

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA
COMPUTAÇÃO**

Juliana Eyng

**Metodologias Diretas por Técnicas de
Fourier-Gegenbauer para a Resolução Numérica de
Equações Diferenciais**

Dissertação submetida à Universidade Federal de Santa Catarina como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Ciência da Computação.

**Prof. Dr. Jáuber Cavalcante de Oliveira,
Orientador**

Florianópolis, Fevereiro de 2003

Metodologias Diretas por Técnicas de Fourier-Gegenbauer para a Resolução Numérica de Equações Diferenciais

Juliana Eyng

Esta Dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de Mestre em Ciência da Computação Área de Concentração Sistemas de Computação e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Ciência da Computação.

Prof. Dr. Jáuber Cavalcante de Oliveira,
Orientador

Prof. Dr. Fernando Ostuni Gauthier,
Coordenador do Curso

Banca Examinadora

Prof. Dr. Jáuber Cavalcante de Oliveira,
Presidente

Prof. Dr. Daniel Santana de Freitas

Prof. Dr. Milton dos Santos Braitt

Ofereço este trabalho aos meus pais, como demonstração de que não foram em vão seus esforços e resignações para me proporcionar a oportunidade de atingir mais um dos objetivos de minha vida.

Agradecimentos

Agradeço à DEUS, por ter me dado a vida e a saúde.

Aos meus pais, que apesar de estarem longe fisicamente, estiveram presentes me aconselhando e me dando forças para seguir em frente nos momentos em que me sentia sozinha e desanimada.

Ao meu orientador, professor Jáuber C. de Oliveira, que sempre esteve presente me motivando na realização deste trabalho.

A minha amiga Andrea, que foi uma grande companheira nas horas de estudos.

Ao meu amigo Ewerton, pela paciência que teve em me ouvir quando precisava desabafar.

Aos meus colegas de laboratório, Luciana, Luciano, Gislaine, Adriana, Augusto e Júlio.

Aos professores e funcionários do departamento de Informática e Estatística pelo apoio e compreensão.

Conteúdo

Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	viii
Resumo	x
Abstract	xii
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	5
3 Séries de Fourier e Transformadas Discreta (TDF) e rápida (FFT) de Fourier	17
3.1 Transformada Finita Contínua de Fourier	17
3.2 Fenômeno de Gibbs	20
3.3 A Transformada Discreta de Fourier (TDF)	21
3.4 Diferenciação por Fourier-Galerkin ou por Colocação	22
3.5 Transformada Rápida de Fourier (TRF)	22
4 O Método de Fourier-Gegenbauer	24
4.1 Uma Introdução à versão por Galerkin do MFG	25
4.2 Extensões do MFG	28
5 Estudo de Problemas-Modelo, Apresentação e Discussão da Metodologia	29
5.1 Aproximação de Funções	29

5.1.1	Metodologia	33
5.2	Aplicação a Equações Diferenciais 1-D	33
5.2.1	Problema-modelo 1	33
5.2.2	Problema-modelo 2	36
5.2.3	Problema-modelo 3	41
5.2.4	Metodologia	43
5.3	Aplicação a Equações Diferenciais 2-D	45
5.3.1	Problema-modelo 1	45
5.3.2	Problema-modelo 2	46
5.3.3	Problema-modelo 3	47
5.3.4	Problema-modelo 4	49
5.3.5	Metodologia	53
5.3.6	Verificação da Convergência de u aproximado para u exato	54
6	Considerações Finais	56
	Bibliografia	58

Lista de Figuras

5.1	Aproximação de $f(x) = x$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=32$ ($\alpha = \beta = 0.25$).	30
5.2	Ordem de convergência dos coeficientes de Fourier. $\log_{10} erro$ em função de N	31
5.3	Ordem de convergência dos coeficientes de Fourier-Gegenbauer. $\log_{10} erro$ em função de N	31
5.4	Aproximação de Fourier para $f(x) = \sin(\pi \cos(x))$	32
5.5	Aproximação de $u(x)$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=128$, ($\alpha = \beta = 0.25$), $\mu = 80$	40
5.6	Aproximação de $u(x)$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=32$ ($\alpha = \beta = 0.25$).	43
5.7	Aproximação de Fourier para $u(x, y)$ exata com $N=16$	47
5.8	$u(x, y)$ exata	48
5.9	Aproximação de Fourier-Gegenbauer para $u(x, y)$ com $N=32$	51
5.10	$u(x, y)$ exata com $N=32$	52

Lista de Tabelas

5.1	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N para $f(x) = x$ ($\alpha = \beta = 0.25$).	30
5.2	Erro máximo da aproximação de Fourier em função de N para $f(x) = \sin(\pi \cos(x))$ ($\alpha = \beta = 0.25$).	32
5.3	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$).	34
5.4	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$) e em polinômios de Chebyshev.	35
5.5	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), com $\mu = 80$	37
5.6	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), com $\mu = 1$	38
5.7	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), $\mu = 80$	38
5.8	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), $\mu = 80$	39
5.9	Erro máximo nas aproximações de Fourier-Gegenbauer em função de μ com $N=128$. Metodologia proposta neste trabalho.	40
5.10	Erro máximo nas aproximações Fourier-Gegenbauer em função de μ com $N=128$. Metodologia proposta por Vozovoi e co-autores.	41
5.11	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$).	42

5.12	Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$) para $t = 0.1$	43
5.13	Erro máximo na expansão de Fourier na aproximação de uma função periódica.	46
5.14	Erro máximo na expansão de Fourier na aproximação de $u(x, y)$ exata. . .	47
5.15	Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ exata periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$).	49
5.16	Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$). .	51
5.17	Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$). .	52

Resumo

A solução de equações diferenciais nem sempre pode ser obtida em forma fechada. Em geral, faz-se necessário utilizar aproximações numéricas que tornem o problema solúvel computacionalmente. O método numérico escolhido na resolução do problema deve apresentar rápida convergência, consistência, estabilidade e baixo custo computacional.

Dentre os métodos numéricos existentes para a resolução aproximada de equações diferenciais, consideramos os denominados métodos espectrais. Os métodos espectrais utilizam séries truncadas de funções suaves (infinitamente diferenciáveis) para representar a solução. Se o problema envolve dados suaves e condições de contorno periódicas, podemos conseguir uma rápida convergência (espectral) utilizando expansões em séries de Fourier. A convergência espectral é alcançada quando o erro de truncamento entre a série (com um número finito N de termos) e a solução exata, decai a zero mais rapidamente que qualquer potência de $1/N$. As expansões espectrais para problemas não-periódicos (em domínios simples e finitos), geralmente utilizam séries em termos de polinômios de Chebyshev ou Legendre. Tais representações apresentam limitações quando precisamos resolver problemas transientes, pois o adensamento de pontos nodais próximo aos contornos implica na necessidade de pequenos passos no tempo para satisfazer a condição CFL.

Nos métodos de Fourier, que envolvem pontos igualmente espaçados, tal restrição está ausente. Além disso, o uso da transformada rápida de Fourier (FFT) reduz significativamente o custo computacional na avaliação das transformadas discretas de Fourier (DFT). Os métodos de Fourier são extremamente eficiente e precisos na resolução de

problemas periódicos.

Nos problemas não-periódicos, não recomenda-se o emprego das séries de Fourier devido a presença de oscilações espúrias próximas ao contorno - o Fenômeno de Gibbs. Para resolver este problema, Gottlieb e co-autores (1992) propuseram o método de Fourier-Gegenbauer, que elimina por completo o fenômeno de Gibbs. O método utiliza séries de Fourier e um resultado fundamental que possibilita re-expandir a aproximação em polinômios de Gegenbauer, calculando os coeficientes da nova expansão em termos da anterior e obtendo acurácia espectral nesta segunda representação.

As metodologias investigadas neste trabalho constroem aproximações numéricas para as soluções das equações de Poisson/Helmholtz. Estas equações tem importância em esquemas numéricos que utilizam tais 'solvers' em esquemas temporais de passos fracionados para resolução das equações de Navier-Stokes (ver por exemplo, Canuto e co-autores (1988)).

Abstract

Only in special cases solutions for partial differential equations are obtained in closed form. Generally, numerical approximations are needed in order to produce computational solutions. The choice of the numerical method relies upon criteria like speed of convergence, consistency, stability and low computational cost.

Among the existing numerical methods that produce approximate solutions for differential equations, we consider spectral methods. Spectral methods use truncated series expansions of smooth, infinitely differentiable, functions that represent the solution. If the problem has smooth data and periodic boundary conditions, then one can obtain fast (spectral) convergence from Fourier series expansions. One obtains spectral convergence when the truncation error between the truncated series (with a finite number of terms, N) and the exact solution, decays to zero faster than any power of $1/N$. Spectral expansions for non-periodic problems (in simple, finite domains) generally utilize series in terms of Chebyshev or Legendre polynomials. Such representations have limitations whenever one needs to solve transient problems, since the high density of nodes close to the boundaries restrict the time step allowed in order to satisfy the CFL condition.

This restriction does not occur in Fourier methods, which involve equally spaced nodes. Furthermore, the use of fast Fourier transforms (FFT) reduce significantly the computational cost due to the evaluation of discrete Fourier transforms (DFTs). Fourier methods are extremely efficient and accurate for solving periodic problems.

However, for non-periodic problems, the use of Fourier series is not recommended due to the presence of spurious oscillations close to the boundaries - the Gibbs phenomenon. In order to circumvent this difficulty, Gottlieb and co-authors (1992) proposed

the Fourier-Gegenbauer method, which completely removes the Gibbs phenomenon. The method is based on Fourier-series and a fundamental result which allows one to re-expand the approximation in Gegenbauer polynomials. The coefficients of the new expansion are calculated from the coefficients of the previous (Fourier) expansion. For smooth (analytic) data, one obtains a new spectrally accurate expansion. The present dissertation investigates techniques for direct solution of differential equations through Fourier-Gegenbauer methods.

Capítulo 1

Introdução

Convergência, precisão e custo computacional tem sido o alvo de estudos na solução de equações diferenciais. Os estudos realizados nesta área mostram as dificuldades existentes na solução destes problemas e as formas computacionalmente eficientes de resolvê-las. Estes estudos são motivados pela grande importância de resolver equações diferenciais computacionalmente, dado que muitos fenômenos físicos são representados desta forma. Dentre outras aplicações que exigem métodos numéricos de elevada acurácia, estão aquelas modeladas pelas equações de destaque na mecânica dos fluidos, as equações de Navier-Stokes. Modelos numéricos de turbulência, a simulação direta de escoamentos turbulentos, e a simulação de modelos de previsão de tempo são alguns exemplos concretos.

O estudo das soluções de equações diferenciais envolve a utilização de alguns métodos numéricos conhecidos, pois a solução das mesmas nem sempre pode ser obtida em forma fechada (através de métodos analíticos ou semi-analíticos). Assim, frequentemente precisamos introduzir aproximações numéricas a fim de obter um problema solúvel computacionalmente e tal que o método numérico associado tenha boas propriedades de estabilidade, consistência, e principalmente convergência.

Neste contexto, quatro classes de métodos têm destaque na atualidade: as diferenças finitas, os volumes finitos, os elementos finitos e os métodos espectrais. A fim de apresentar os objetivos gerais deste trabalho, descreveremos sucintamente estas classes de

métodos para então localizar nosso foco de trabalho.

O método das diferenças finitas (Thomas (1995) e Strikwerda (1989)) é certamente o mais antigo dentre os citados. Seu princípio geral é bastante simples: aproximar operadores diferenciais por operadores de diferenças visando obter sistemas lineares com esparsidade elevada cujas incógnitas representam os valores aproximados da solução nos pontos nodais dispostos sobre o domínio computacional. Estes métodos tendem a produzir esquemas bastante eficientes computacionalmente e de fácil implementação. Suas desvantagens principais são: a imposição de condições de contorno mais complicadas, resolução de problemas em domínios complicados e baixa acurácia. Recentemente, esquemas de acurácia mais elevada tem sido desenvolvidos, porém, como consequência natural, os demais fatores são afetados adversamente.

O método dos elementos finitos (Becker e co-autores (1981); Braess (1997)) consiste em dividir o domínio do problema em um número finito de subdomínios, chamados de elementos. A partir da teoria variacional de EDPs, reformula-se o problema em um problema variacional em espaços de dimensão finita, onde representa-se a aproximação em termos de certas funções de base polinomiais por partes. A solução deste problema variacional discreto conduz à necessidade de resolução de sistemas lineares esparsos, que, quando resolvidos, possibilitam a construção de uma aproximação da solução em todos os elementos. Os elementos finitos possuem vantagens computacionais em problemas envolvendo geometrias complicadas. Além disso, desfrutam de uma teoria rigorosa, e bastante avançada, de análise de erros, estabilidade e convergência (Brenner Escott (1994); Ciarlet (1978); Oden e Reddy (1976); Girault e Raviart (1986)). Esta versão clássica do método emprega polinômios de grau fixo e suporte local, e como consequência, os erros decaem algebricamente com o tamanho da malha. Versões mais recentes do método, o “p-Finite element”, fixam a malha e elevam o grau dos polinômios a fim de obter acurácia elevada (Babuska e Suri (1994)).

O método dos volumes finitos (Maliska (1995); Patankar (1981)) consiste em dividir o domínio de interesse em subdomínios (os “volumes”). A idéia central é inte-

grar as equações diferenciais sobre cada volume e utilizar expansões em séries de Taylor para relacionar as variáveis nas faces dos volumes com as variáveis nos centros de cada volume. Este processo de discretização resulta em sistemas lineares algébricos com estrutura muito similar ao das diferenças finitas. Embora estes métodos sejam de fácil implementação e podem ser empregados em problemas com geometrias complicadas (via mapeamentos), em geral produzem soluções de baixa acurácia (segunda ordem no melhor dos casos). A obtenção de esquemas de mais alta ordem aproximam ainda mais estes métodos de esquemas de diferenças finitas. Mais recentemente, estes métodos tem sofrido forte influência dos elementos finitos (Raw (1985); Maliska (2003)).

Os métodos espectrais (Boyd (2000); Canuto e co-autores (1988); Gottlieb e co-autores (1977)) utilizam expansões em séries truncadas de funções infinitamente diferenciáveis a fim de representar soluções de equações diferenciais. Enquanto o método dos elementos finitos é baseado na expansão em funções de base locais, os métodos espectrais são baseados na expansão em funções de base globais. Nas expansões espectrais geralmente utilizamos séries de polinômios ortogonais, como os polinômios de Chebyshev, Legendre, Laguerre, etc. Expansões em séries de Fourier também são “espectrais” quando envolvem condições de contorno periódicas. A aproximação espectral quando aplicada de forma correta, fornece excelentes resultados. O erro entre a solução exata e a aproximação espectral, decai a zero exponencialmente com o número de termos da série truncada (a denominada convergência espectral). Em contraste, os métodos citados anteriormente apresentam erros de truncamento com decaimento algébrico (em função do espaçamento da malha, por exemplo). Os métodos espectrais tornaram-se populares desde 1970, principalmente a partir do desenvolvimento dos métodos de transformada rápida, com aplicações em previsões numéricas do tempo, simulações diretas de escoamentos turbulentos, análises de estabilidade de escoamentos, e outros problemas onde alta acurácia é requerida.

Com a intenção de criar um método para resolver geometrias mais complicadas, Patera (1984) propôs o método dos elementos espectrais, que uniu a acurácia dos métodos espectrais com a generalidade dos elementos finitos.

A monografia de Gottlieb e Orszag (1977) é o primeiro a apresentar uma discussão sistemática dos métodos espectrais. Nessa monografia os métodos utilizando séries de Fourier são recomendados apenas para problemas periódicos, onde atingem acurácia espectral.

Gottlieb e co-autores (1992) propuseram um procedimento para remoção do fenômeno de Gibbs, presentes em séries de Fourier truncadas de funções analíticas e não periódicas. O fenômeno de Gibbs manifesta-se por meio de oscilações espúrias próximo aos contornos do domínio, ou seja, próximo a descontinuidade da função há oscilações que não decaem com o número de termos retidos na série. Isto é a consequência da não periodicidade da função. Logo, o método proposto permite aplicar o método de Fourier para problemas não periódicos e mesmo assim obter acurácia espectral.

O presente trabalho é uma continuação natural de um trabalho anterior (Oliveira e Silva (1999)) onde resultados preliminares sobre a aplicação do método de Fourier-Gegenbauer, originalmente proposto por Gottlieb e co-autores (1992), à resolução computacional de equações diferenciais foram apresentados.

Neste trabalho empregamos o software MATLAB como ambiente de programação. O MATLAB é uma linguagem de alto nível, específica para computação científica, com poderosa interface gráfica e desempenho mais eficiente a cada nova versão.

O objetivo deste trabalho é desenvolver metodologias para resolver equações diferenciais através da construção de variações do método de Fourier-Gegenbauer. Estudaremos apenas a versão associada ao método de Fourier-Galerkin.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Resumo: Este capítulo tem por objetivo revisar os trabalhos publicados na literatura que tem relevância para o presente trabalho. Os trabalhos considerados dizem respeito aos métodos de Fourier, Fourier-Gegenbauer, métodos espectrais e elementos espectrais.

Na atualidade, os métodos numéricos com maior destaque são as diferenças finitas, os volumes finitos, os elementos finitos e os métodos espectrais. A fim de apresentar os objetivos deste trabalho, concentramos esforços no estudo da literatura disponível sobre métodos espectrais, dando maior ênfase a uma classe particular destes métodos: os métodos de Fourier-Gegenbauer. Estes estudos são necessários à compreensão dos conceitos básicos, idéias centrais e resultados fundamentais sobre métodos espectrais, bem como dos outros métodos numéricos utilizados na aproximação de funções e na solução de equações diferenciais. A seguir, apresentamos uma breve revisão da literatura sobre o assunto.

Orszag (1972) utiliza alguns problemas-modelo para comparar a acurácia da aproximação espectral por colocação, que denominaremos espectral-colocação, e a aproximação espectral pelo método de Galerkin, que denominaremos espectral-Galerkin. Para um simples problema hiperbólico, usando séries de Fourier, a aproximação pseudoespectral apresenta erros de alcinha (ou distorção - aliasing, no inglês). Por outro lado, a aproximação espectral-Galerkin não apresenta tais erros. Mesmo assim, a aproximação espectral-

colocação possui vantagens operacionais sobre a aproximação espectral. A primeira requer somente duas transformadas rápidas de Fourier para solução do problema em questão, enquanto a segunda requer quatro transformadas rápidas de Fourier. As transformadas discretas de Fourier são implementadas eficientemente em $N \log N$ operações pelo algoritmo de transformada rápida de Fourier. Logo, para problemas mais complicados, o método espectral mais rápido requer, no mínimo, duas vezes o número de transformadas rápidas de Fourier, quando comparado ao método pseudoespectral. Além disso, para um mesmo problema, o código pseudoespectral é mais simples de implementar que o código espectral correspondente. Por fim, a aproximação pseudoespectral é aplicada a uma maior classe de problemas do que a aproximação espectral. A única desvantagem da aproximação pseudoespectral é que ela está propensa a instabilidade numérica devido aos erros de alcinha. Em Canuto e co-autores (1988) são descritos métodos para remoção destes erros. Outro exemplo apresentado no trabalho de Orszag é o da expansão em série de polinômios de Chebyshev. Neste exemplo, fica claro que os erros envolvidos na aproximação espectral-colocação e espectral-Galerkin são similares quando a expansão apresenta rápida taxa de convergência.

Gottlieb e Orszag (1977) é o primeiro trabalho a apresentar uma discussão sistemática dos métodos espectrais. Os métodos espectrais consistem em representar a solução do problema por uma série truncada de funções conhecidas. Esta representação é feita utilizando métodos de aproximações chamados Galerkin, Tau ou Colocação (pseudoespectral). Dentre estes, os mais utilizados são Galerkin e Colocação usando séries de Fourier ou Chebyshev. Outros polinômios ortogonais também podem ser utilizados como Legendre, Laguerre, etc. O trabalho apresenta a solução de problemas clássicos utilizando os métodos citados, mostrando que a diferença entre estas aproximações está no tratamento que cada um faz nos termos de contorno (em problemas mais complicados, existem outras diferenças mais significativas). Assim sendo, as condições de contorno impostas pelo problema são fatores decisivos na escolha da representação espectral apropriada. Esta escolha vai garantir a convergência espectral ou não do método, ou seja, o erro de truncamento entre a solução exata e a aproximação espectral decai a zero expo-

nencialmente com o número de termos da série aproximante. Nesse trabalho os métodos que utilizam séries de Fourier são recomendados apenas para problemas periódicos. Caso contrário, teremos a presença do fenômeno de Gibbs (oscilações espúrias próximo ao contorno).

Obtidos bons resultados com uso de métodos espectrais na solução de problemas em domínios retangulares, Orszag (1980) estende o método para resolver problemas em domínios mais complicados. Segundo o autor, as expansões espectrais devem utilizar séries de polinômios ortogonais (como Chebyshev e Legendre), a menos que as condições de contorno do problema sejam compatíveis com outra classe de autofunções, podendo neste caso, utilizar séries de Fourier. Para muitos problemas em domínios complicados, torna-se difícil encontrar um conjunto de funções de expansão espectral que consiga uma "sintonia" com os detalhes da geometria. Isto causa dificuldades computacionais e de convergência. Para evitar esses problemas, a idéia foi criar um método geral e poderoso, que preservasse todas as características dos métodos espectrais em geometrias simples. Esta nova formulação do método utiliza o sistema chamado "mapping" e "patching". A função do "mapping" é transformar o domínio complicado em um mais simples, enquanto o "patching" subdivide o domínio complicado em subregiões de modo que as expansões espectrais sejam válidas em cada subregião. Depois, resolve-se o problema na região complicada, aplicando condições de continuidade nas fronteiras comuns entre os subdomínios.

Patera (1984) propôs o método dos elementos espectrais para resolver as equações de Navier-Stokes. Este método uniu a acurácia dos métodos espectrais com a generalidade dos elementos finitos. Inicialmente, Patera apresentou o problema modelo unidimensional, a equação advecção-difusão. Utilizando o esquema de Adams-Bashforth para o operador da onda e o método de Crank-Nicolson para o termo de difusão, obteve uma forma discretizada no tempo para a equação em questão. Estas formas são similares às equações de Navier-Stokes. A solução destas equações a cada passo de tempo envolve uma equação da onda, uma equação de Poisson (para pressão) e uma equação de Helmholtz (para o termo viscoso). O método dos elementos espectrais aplicado ao

problema modelo, consiste em particionar o domínio computacional em uma série de elementos. Dentro de cada elemento a função é representada através de um interpolante Lagrangeano com pontos de colocação de Chebyshev. A parte hiperbólica (equação da onda) é avaliada por colocação. Apenas a continuidade da função é requerida, sendo facilmente satisfeita na representação pelo método dos elementos espectrais. Para avaliar as equações de Helmholtz e Poisson, por este método, é necessário um princípio variacional equivalente, que utiliza o interpolante Lagrangeano como função teste. Para demonstrar a acurácia do método dos elementos espectrais, Patera resolveu a equação de Poisson utilizando o método espectral, o método dos elementos espectrais (com dois elementos) e o método dos elementos finitos (quadrático). Como esperado, o método espectral e dos elementos espectrais convergiram exponencialmente, enquanto o método dos elementos finitos convergiu algebricamente. Para o problema modelo, a solução pelo método dos elementos espectrais possui maior acurácia comparado a técnica dos elementos finitos. Os exemplos mostram que quanto mais complexo é o domínio, mais inapropriado torna-se o uso do método espectral.

Dando continuidade ao trabalho sobre elementos espectrais, Korczak e Patera (1985) apresentam a técnica dos elementos espectrais isoparamétricos na solução de equações de Navier-Stokes bidimensionais em domínios arbitrários. O primeiro passo foi apresentar a formulação isoparamétrica para as equações de Helmholtz, que consiste no mapeamento de um elemento mestre (em um sistema de coordenadas locais), em cada um dos elementos reais da malha (no espaço físico). As funções de forma em cada elemento são interpoladores de Lagrange. A representação do espaço local é dada por pontos de colocação de Chebyshev Gauss-Lobatto e a malha física é especificada exatamente, de acordo com a distribuição dos pontos de colocação. Este procedimento nos leva a resolver um sistema de equações, que, por mais preciso, possui pouco interesse prático a menos que seja resolvido eficientemente. Neste caso, foi aplicado o método de condensação estática. A convergência do método dos elementos espectrais foi analisada quando aplicado a problemas elípticos de segunda ordem. Foi considerado o caso onde a solução converge quando aumenta-se o número de elementos. São três as contribuições para o erro: o funcional

é minimizado em um subespaço restrito; os termos não homogêneos no funcional, não são integráveis exatamente e as perturbações no funcional causadas pela não exatidão da integração e representação dos fatores de transformação geométrica. A primeira fonte de erro não depende da escolha dos pontos de colocação. Já a segunda e terceira dependem fortemente desta escolha. A escolha por pontos de colocação de Chebyshev para coordenadas físicas e locais é razoável na solução de problemas de interpolação, pois a representação de Chebyshev de funções suaves converge exponencialmente. Estudos empíricos mostram que, para soluções suficientemente suaves, o método converge exponencialmente. Para demonstrar a convergência, foi utilizado o método do elemento espectral para solução da equação de Poisson em uma região anular. Todas as malhas apresentadas fornecem convergência exponencial para este problema em particular. Se o domínio apresentar singularidades, a convergência não será mais a mesma, neste caso, aplica-se uma técnica de refinamento e a convergência será apenas de ordem finita. O esquema de time-splitting, também denominado método dos passos fracionados, para as equações de Navier-Stokes foi apresentado. O caso semi-discreto (no tempo), trata os termos não lineares usando Adams-Bashforth de terceira ordem por ter grande estabilidade. A formulação reduz a tarefa computacional de resolução das equações de Navier-Stokes à resolução de uma equação de Poisson (para pressão) e duas de Helmholtz (para o vetor velocidade). O esquema de splitting atinge comparável acurácia para métodos de alta ordem, a um baixo custo computacional. Os autores também mostram como este esquema pode ser implementado para domínios complicados no contexto dos elementos espectrais.

Comentários sobre filtros para métodos espectrais de Chebyshev e Legendre e de elementos espectrais, foram apresentados por Boyd (1998). Uma forma de reduzir ruídos numéricos com métodos espectrais de Chebyshev ou Legendre é filtrar os coeficientes, ou seja, substituir a série truncada de Chebyshev ($u_N(x)$) por sua série filtrada ($u_F(x)$), para alguma função filtro. O problema é que o uso de filtros violam as condições de contorno. Por exemplo, se $u(\pm 1)=0$, a função filtrada não é zero em ambos os extremos, exceto em casos especiais. Então, a proposta é simplificar as modificações do filtro para que $u_F(x)$ satisfaça as mesmas condições de contorno como $u_N(x)$. A idéia é reescrever $u_N(x)$ em

termos de novas funções base que satisfaçam as condições de contorno homogêneas e então aplicar o filtro modificando os coeficientes desta nova expansão. Se as condições de contorno não forem homogêneas a solução $u(x)$ é dividida na soma de um polinômio de baixo grau que satisfaz as condições de contorno não homogêneas, mais uma soma sobre as funções base que satisfaça as condições de contorno homogêneas equivalente. A escolha da base é feita entre as inúmeras combinações lineares dos polinômios de Chebyshev que satisfaz cada conjunto de condições de contorno, e que apresentam os menores erros de arredondamento. O equivalente acontece com os polinômios de Legendre. O autor explica que o uso correto dos filtros, permite adicionar uma viscosidade adicional na computação do problema usando polinômios de Chebyshev ou Legendre e ainda preservar as condições de contorno originais.

Gottlieb e co-autores (1992) propõem um procedimento para remoção do fenômeno de Gibbs, presente em séries de Fourier truncadas de funções analíticas e não periódicas, que causam oscilações espúrias próximo aos contornos do domínio. Ou seja, próximo à descontinuidade há oscilações que não decaem com o número de termos retidos na soma espectral. Isto é a consequência da não-periodicidade da função. Esse método permite aplicar o método de Fourier para problemas não-periódicos e mesmo assim obter acurácia espectral. Fourier-Gegenbauer é o método proposto que elimina por completo o fenômeno de Gibbs presente nestes problemas. Os autores provam que, os coeficientes de Fourier $\hat{f}(k)$, $|k| \leq N$ de uma função analítica e não periódica $f(x)$, $x \in [-1, 1]$, contém informações suficientes para construir, com acurácia espectral, a expansão de Gegenbauer para esta função em todo intervalo, incluindo as descontinuidades $x = \pm 1$. Os polinômios de Gegenbauer $C_l^\lambda(x)$ são ortogonais em $[-1, 1]$ com as funções pesos $(1 - x^2)^{\lambda-1/2}$. Os coeficientes de Gegenbauer podem ser expressos de forma fechada em termos dos $\hat{f}(k)$. O trabalho apresenta, de forma sucinta, os polinômios de Gegenbauer. Em seguida, inicia os passos que provam a remoção do fenômeno. O primeiro passo diz que, dada a soma parcial dos primeiros $2N+1$ coeficientes de Fourier de uma função analítica, não periódica, é possível descobrir a soma parcial dos primeiros m coeficientes na expansão de Gegenbauer da mesma função, com acurácia espectral (exponencial) na norma do máximo. O

erro entre os coeficientes de Gegenbauer exatos e a série de Fourier truncada é denotado como o *erro de truncamento*. A cota superior obtida para esse erro constitui um dos teoremas importantes (teorema 3.4 do trabalho). O próximo passo estabelece uma cota superior para o erro entre a série truncada em polinômios de Gegenbauer e a função dada, chamado *erro de regularização*, provando a convergência espectral (exponencial) na norma do máximo. Por fim, é construído o teorema principal (teorema 5.1 do trabalho) a respeito da remoção do fenômeno de Gibbs. Resultados numéricos são apresentados usando toda esta teoria.

Gottlieb e Shu (1995a), também investigaram a remoção do fenômeno de Gibbs, visando obter acurácia espectral em todos os pontos, incluindo as próprias descontinuidades. Existem alguns esquemas de Fourier-Gegenbauer, que utilizam aproximações por Fourier (Galerkin), baseados em polinômios trigonométricos para problemas periódicos ou não, e os que empregam aproximações por Chebyshev e Legendre para problemas não periódicos. Nestes casos, o objetivo é aproximar funções analíticas por partes, removendo os fenômenos de Gibbs presentes devido às descontinuidades da função. Nesse trabalho, a prova cobre os casos de séries em polinômios de Chebyshev e Legendre, comuns em muitas aplicações. Os passos da prova são os mesmos citados em Gottlieb e co-autores (1992). A diferença agora está na série utilizada e no fato que a função é analisada em um subintervalo $[a, b] \subset [-1, 1]$, onde ela é analítica. Desta forma obtém-se acurácia espectral sobre o intervalo $[a, b]$. O erro de truncamento é dado pela distância entre a expansão de Gegenbauer no intervalo $[a, b]$ e sua aproximação baseada na soma parcial de Gegenbauer em $[-1, 1]$. O erro de regularização causado pelo uso da expansão finita de Gegenbauer em um subintervalo $[a, b] \subset [-1, 1]$ para aproximar uma função que é analítica neste subintervalo, é estudado em Gottlieb e co-autores (1996). Combinando as estimativas para os erros de truncamento e regularização, obteve-se o principal teorema do trabalho (teorema 4.3). Para ilustrar a teoria, os autores apresentaram dois exemplos numéricos que usam séries de Chebyshev, por serem mais frequentemente utilizadas na prática. Os exemplos mostram que para diferentes subintervalos, a convergência espectral é obtida.

Gottlieb e Shu (1995b) mostram que, dados os pontos de colocação (ou uma aproximação altamente precisa) de Gauss ou Gauss-Lobatto, pode-se reconstruir uma aproximação convergente espectralmente para uma dada função, e algum subintervalo $[a, b] \subset [-1, 1]$ onde a função é analítica. A prova aborda os casos de Fourier, Chebyshev, Legendre e métodos de colocação de Gegenbauer mais gerais. Novamente a prova segue os mesmos passos dos trabalhos anteriores. Neste caso, o erro de truncamento é dado pela distância entre a expansão de Gegenbauer no intervalo $[a, b]$ e sua aproximação baseada nos pontos de colocação da função $f(x)$ em $[-1, 1]$. O erro de regularização causado pelo uso da expansão finita de Gegenbauer baseada no subintervalo $[a, b] \subset [-1, 1]$, para aproximar uma função que é analítica neste subintervalo, estudado em [19]. Mais uma vez, combinou-se as estimativas para os erros truncamento e regularização, obtendo o principal teorema do trabalho (teorema 4.2). Os exemplos numéricos utilizaram os casos de Fourier e Chebyshev. Para o método de Fourier, desde que os pontos de colocação sejam igualmente espaçados, podemos escolher todos os pontos de colocação em $[-1, 1]$ para contruir a aproximação em $[a, b]$ (global-local); ou utilizar apenas os pontos de colocação em $[a, b]$, usando um mapeamento para expandir $[a, b]$ para $[-1, 1]$ (local-local). Ambos procedimentos foram aplicados e produziram resultados similares, convergindo espectralmente. Aplicando Chebyshev no mesmo exemplo, com os procedimentos (global-global) e (local-local), novamente obteve-se resultados similares com convergência espectral.

A não-uniformidade da convergência das séries de Fourier para funções descontínuas, e em particular, o comportamento oscilatório da soma finita, é chamado de fenômeno de Gibbs. Este assunto foi discutido em Gottlieb e Shu (1996) que apresentaram um procedimento para eliminar completamente o fenômeno de Gibbs. Este fenômeno não está relacionado apenas com aproximações de Fourier de funções analíticas e não periódicas. Existem muitas outras situações em que o fenômeno de Gibbs se manifesta, como é o caso das expansões baseadas nos polinômios de Chebyshev e Legendre (estes polinômios são casos especiais dos polinômios de Gegenbauer). Para resolver o fenômeno de Gibbs no caso de expansões de Fourier, Gottlieb e Shu apresentam duas classes de métodos. A primeira classe contém todos os métodos que tratam a aproximação no espaço de Fourier,

modificando os coeficientes de expansão. Os coeficientes de Fourier são multiplicados por um fator que modifica a série finita tornando-a com convergência mais rápida que a série original. Este fator é chamado de filtro. A aplicação do filtro no espaço Fourier não aumenta o custo computacional ($N \log_2 N$) e recupera a acurácia espectral até mesmo nas descontinuidades. A segunda classe considera os métodos que tratam a aproximação no espaço físico. O procedimento é semelhante ao anterior, mas o custo computacional é maior. Um estudo dos erros de truncamento e regularização é feito para estas duas classes de métodos, mostrando que a aproximação converge espectralmente na norma do máximo, como pode ser visualizado nos exemplos numéricos apresentados.

Oliveira e Silva (1999) desenvolveram uma metodologia computacional baseada no método de Fourier-Gegenbauer proposto por Gottlieb e co-autores (1992), e estendido por Gelb e Gottlieb (1997) para o caso bidimensional, e aplicaram-na a equações diferenciais parciais em domínios retangulares envolvendo condições de contorno não-periódicas. O trabalho explora a simetria dos problemas investigados para obter aproximações por Fourier-Gegenbauer com acurácia espectral.

Vozovoi e co-autores apresentam trabalhos sobre uma técnica multidomínio espectral e aplicação do método de Fourier-Gegenbauer na solução de equações diferenciais. Dentre esses, os que contribuíram diretamente para o desenvolvimento deste trabalho, serão citados a seguir.

O método de Fourier-Gegenbauer (FG), introduzido em Gottlieb co-autores (1992), recupera os valores da função não periódica através de seus coeficientes de Fourier, eliminando o fenômeno de Gibbs. Vozovoi e co-autores (1996), sugeriram um método de Fourier espectral de alta ordem para solução de problemas não-periódicos, modificando o algoritmo de FG original. Este novo algoritmo incorpora novas técnicas como subtração polinomial para acelerar a convergência das séries de Fourier. O algoritmo de FG é implementado somente nos extremos do intervalo, para avaliar as derivadas da função nos contornos. Esta nova proposta, recebe o nome de método de Fourier-Gegenbauer Híbrido. Nesse trabalho, os aspectos numéricos do método de FG estão relacionados com a versão pseudoespectral deste método. Neste caso, temos os $2N+1$ coeficientes de Fourier do

interpolante, enquanto que no método de Galerkin as informações dadas são os $2N+1$ coeficientes de Fourier da própria função. A acurácia do método híbrido foi demonstrada através de exemplos, comparado-o com o método FG “puro”. Em todos os exemplos o método híbrido apresentou acurácia muito maior a do método de FG. A implementação eficiente do método de FG está restrito aos casos onde as funções são suaves. Para funções oscilantes ou com fortes gradientes, a série de Gegenbauer converge lentamente. Mas o algoritmo de FG é muito útil na aproximação por decomposição de domínio, combinado com o método de bases de Fourier locais.

Vozovoi e co-autores (1997), propuseram a extensão do método de Fourier Gegenbauer (FG) de Gottlieb e co-autores (1992), com acurácia espectral, para avaliar as derivadas de um função analítica por partes e também na solução de equações diferenciais não-periódicas. O procedimento de Gottlieb e co-autores (1992) foi analisado e de acordo com a demonstração, pode-se mostrar que o erro de truncamento na aproximação das derivadas e integrais de $f(x)$ torna-se pequeno quando existe uma relação linear entre m (número de termos da série de Gegenbauer), λ (parâmetro da função peso) e N (número de termos da série de Fourier). De acordo com a teoria apresentada neste trabalho sobre a convergência das séries de FG para as derivadas e integrais, o erro aumenta com o número de derivadas. Esta estimativa pode ser visualizada nos exemplos numéricos. Os autores mostram também que a convergência das séries de Fourier pode ser melhorada subtraindo-se uma função linear da função original. A solução das equações diferenciais foi realizada em dois etapas. A primeira constituiu em utilizar o método de FG para construir uma solução particular com condições de contorno arbitrárias. Esta solução particular é então corrigida (funções de Green nos contornos) para satisfazer as condições de contorno do problema. Esta correção é feita adicionando uma combinação linear de soluções homogêneas. A outra etapa é compensar a perda da acurácia causada pela solução particular, que apresenta perfis íngremes perto dos contornos. Estas regiões íngremes introduzem grandes erros na solução final que possui um perfil suave no intervalo inteiro. Através de exemplos numéricos os autores mostraram que as correções na solução particular recuperou a acurácia espectral. A acurácia espectral também foi

obtida aplicando a técnica na solução de problemas dependentes do tempo. Os autores deixam claro a necessidade de um “solver” de FG para problemas elípticos em regiões retangulares sem direções periódicas.

Vozovoi co-autores (1996) propõem um método direto para resolver a equação de Poisson em domínios retangulares. O método é baseado na aproximação por Fourier pseudoespectral e na técnica de subtração polinomial. A rápida convergência da série de Fourier é alcançada removendo as descontinuidades usando funções de subtração polinomial. Esse método é apresentado em dois passos. O primeiro passo consiste em computar uma solução particular para equação de Poisson ($\Delta u = f$), u_p , com alguma condição de contorno (zero ou periódica). O segundo passo é computar a solução da equação de Laplace ($\Delta u = 0$), u_h e adicioná-la a solução particular do passo anterior, $u = u_p + u_h$, obtendo uma solução para a equação de Poisson com condições de contorno (CC) corretas. No primeiro passo, para construir a solução particular é usado o método de Bases de Fourier Locais (BFL) de Vozovoi (1993) e (1994). A idéia é projetar o forçante de forma suave no domínio estendido. Depois, expande-se o forçante suavizado em uma série de Fourier de convergência rápida. No segundo passo, resolve-se um problema de valor no contorno (PVC) auxiliar obtendo a CC verdadeira. Usa-se a técnica de subtração polinomial para acelerar a convergência das séries de Fourier. A idéia consiste na remoção de todas as descontinuidades nas CC, que surgem devido a não periodicidade e a não suavidade da função nos contornos. A função de subtração é construída por funções polinomiais harmônicas para evitar o aparecimento de termos não periódicos e não homogêneos. Os autores apresentam o primeiro algoritmo para a solução de PVC (de Dirichlet ou Neumann) baseado na técnica de separação de variáveis para CC periódicas. A equação de interesse a ser resolvida é a equação de Laplace onde aplica-se a transformada discreta em senos (DST) para obter os coeficientes de expansão. Esses coeficientes são multiplicados por funções hiperbólicas. A transformada para o espaço físico é feita usando a DST inversa. Para CC de Neumann o procedimento é similar. A diferença agora está na aplicação da transformada discreta em cossenos (DCT) para obter os coeficientes de expansão. No caso de CC não periódicas, a série trigonométrica exhibe o fenômeno de

Gibbs próximo aos contornos. A convergência próximo aos contornos pode ser acelerada subtraindo-se uma função polinomial de forçante. Este procedimento é descrito em forma algorítmica para o caso unidimensional. Um terceiro algoritmo é apresentado para o caso bidimensional utilizando essa técnica. O trabalho apresenta também uma função de subtração harmônica que satisfaz a equação de Laplace, no caso analítico e singular. No caso analítico, o erro obtido na solução numérica usando a função subtração é muito menor que no método da quadratura trapezoidal. No caso singular, o que se faz é extrair a parte singular da solução e trabalhar apenas com a parte suave. Essa aproximação fornece resultados melhores usando uma função de subtração do que um método de alta ordem. Por fim, os autores apresentam o quarto algoritmo que resolve a equação de Poisson, envolvendo os algoritmos anteriormente comentados. A eficiência do algoritmo é ilustrada em alguns exemplos, que demonstram a rápida convergência do método. A principal ferramenta nesse trabalho é a transformada rápida de Fourier. O método proposto mostra-se ser rápido e com acurácia de alta ordem. Problemas com coeficientes não constantes podem ser tratados usando esse método combinado com um método de iteração pré-condicionado.

Capítulo 3

Séries de Fourier e Transformadas Discreta (TDF) e rápida (FFT) de Fourier

Sumário: Este capítulo aborda os fundamentos teóricos clássicos do trabalho com ênfase especial no fenômeno de Gibbs e na caracterização e propriedades da transformada discreta de Fourier.

3.1 Transformada Finita Contínua de Fourier

Funções Periódicas

Consideremos funções f reais a valores complexos. Dizemos que u é T -periódica se

$$u(x + T) = u(x)$$

e T é o menor número positivo que satisfaz esta igualdade.

Através da mudança de variável $g(x) = u\left(\frac{T}{2\pi}x\right)$, observa-se que basta considerar funções 2π -periódicas, que abreviaremos para 'periódicas'.

Dentre as funções desta classe, estudaremos primeiramente o problema de aproximação de funções periódicas contínuas por uma série de funções periódicas infinitamente

diferenciáveis, que denominaremos funções de base. Posteriormente, analisaremos a situação em que tal série é utilizada para aproximar funções não periódicas.

É natural usar funções seno e cosseno, isto é

$$\{1, \sin(x), \cos(x), \sin(2x), \cos(2x), \dots\}$$

como funções de base. Outra representação equivalente, e conveniente em certas aplicações, utiliza exponenciais complexas $(\exp(ikx))_{k \in \mathbb{Z}}$.

Série de Fourier

Dada uma função contínua e periódica $u(x)$, define-se que

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx)$$

é a série de Fourier (em forma exponencial) para $u(x)$ se

$$c_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(x) \exp(-ikx) dx.$$

É usual empregar a notação $u(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \exp(ikx)$ para lembrar que são necessárias hipóteses adicionais sobre u para que tenhamos convergência. De fato, é necessário especificar que tipo de convergência podemos ter nesta representação.

O espaço das funções contínuas e periódicas, denotado $C_{per}(R)$, torna-se um espaço pré-Hilbert quando munido do seguinte produto interno

$$\langle u, v \rangle = \int_0^{2\pi} u(x) \overline{v(x)} dx.$$

Este espaço linear com produto interno não é completo, i.e., existem seqüências de funções contínuas e periódicas que convergem para funções que não estão em $C_{per}(R)$. No entanto, o complemento deste espaço produz o conhecido espaço L^2 , formado pelas funções cujo quadrado é (Lebesgue) integrável.

Os detalhes sobre estes assuntos fogem ao escopo desta dissertação e podem ser encontrados em livros de Análise Funcional (por exemplo, Kreyszig (1978)). O resultado

fundamental com relação ao assunto deste capítulo é que as séries de Fourier de funções em L^2 convergem a estas funções no sentido da média quadrática, isto é,

$$\|P_N u - u\| \rightarrow 0,$$

quando N tende ao infinito, onde $P_N := \sum_{k=-N}^N c_k \exp(i k \pi x)$ é a **série de Fourier truncada** e $\|\cdot\|$ representa a norma gerada pelo produto interno.

Condições para Convergência da Série de Fourier

Se tivermos apenas $u \in C_{per}(R)$, a convergência da série de Fourier ponto a ponto para $u(x)$ não é garantida. No entanto, se $\sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k < \infty$, então a série converge a u absoluta e uniformemente em $[0, \pi]$. O mesmo tipo de convergência ocorre se $u \in C^2$ com u e sua derivada primeira periódicas.

Um resultado clássico que é fundamental para este trabalho estabelece o seguinte: se $u \in C_{per}^n(R)$ para algum $n \in \mathbb{N}$ de modo que u e todas as suas derivadas até a ordem $n-1$ sejam periódicas, então a série de Fourier converge uniformemente a $u(x)$ e os coeficientes de Fourier de u satisfazem $|a_k|, |b_k| \leq C/k^{n+\alpha}$, para $k \in \mathbb{N}$, desde que $u^{(n)}$ satisfaça uma condição de Lipschitz de ordem $\alpha \in (0, 1]$.

Outro resultado similar estabelece que se $u \in C_{per}^n(R)$ é tal que $u^{(n+1)}$ é (Lebesgue) integrável, então $|a_k|, |b_k| \leq C/k^{n+1}$ e a série de Fourier converge uniformemente a $u(x)$ em $[0, 2\pi]$. A convergência uniforme e absoluta da série também é garantida se $u \in C_{per}(R)$ tem derivada em $L^2[0, 2\pi]$.

A convergência pontual ocorre se:

- (i) u for diferenciável no ponto, ou
- (ii) u satisfaz uma condição de Lipschitz de ordem $\alpha > 0$ em x , ou seja,

$$|u(x+t) - u(x)| \leq C t^\alpha$$

onde C denota uma constante, ou

- (iii) $u \in L^1[0, 2\pi]$ é tal que $u(x^+)$, $u(x^-)$, $u'(x^+)$ e $u'(x^-)$ existem.

Um corolário de destaque estabelece que se $u \in L^1[0, 2\pi]$ for C^1 por partes em $I = [a, b]$ com $0 \leq a < b \leq 2\pi$, então a série de Fourier de u converge em todos

os pontos de I. A convergência para $u(x)$ ocorre nos pontos de continuidade de u , caso contrário tem-se a convergência para a média dos limites laterais de u em x .

Maiores detalhes sobre tais resultados e vários outros de mesma natureza podem ser encontrados, por exemplo, em Davis (1975).

3.2 Fenômeno de Gibbs

Dada a importância deste tema para o presente trabalho, descreveremos detalhadamente nesta seção o fenômeno descoberto por Michelson que construiu uma máquina para calcular coeficientes de Fourier de funções periódicas e aproximar funções periódicas a partir de seus coeficientes de Fourier. Gibbs elucidou heurísticamente o fenômeno em 1899, e com isso teve seu nome atribuído ao fenômeno. Em 1906, o matemático Bôcher demonstrou matematicamente o fenômeno e estendeu o resultado enunciado por Gibbs.

O fenômeno de Gibbs caracteriza-se pela presença de oscilações espúrias próximo a pontos de descontinuidade da função a ser aproximada pela série de Fourier. Ao aumentarmos o número de termos da expansão, observa-se que tais oscilações tornam-se cada vez mais próximas do ponto de descontinuidade, mas não diminuem de intensidade, causando um erro máximo de 17 a 18 por cento em uma certa vizinhança da descontinuidade.

Para apreciar este fenômeno em mais detalhe, consideremos a função dente-de-serra dada por $h(x) = x$, se $x \neq \pi$, e $h(x) = 0$ se $x = \pi$. Então, prova-se que a série de Fourier com N termos converge a $\mu\pi$ para $x = \pi - \pi/N$, e a $-\mu\pi$ para $x = -\pi + \pi/N$, onde $\mu = (2/\pi) \int_0^\pi \frac{\sin(x)}{x} dx > 1,17$. A aproximação deveria aproximar os valores máximo (1) e mínimo (-1) de $u(x)$. Ao invés de atingir os valores desejados, a aproximação ultrapassa o valor máximo e não atinge o valor mínimo. O primeiro gráfico do capítulo 5 deste trabalho ilustra a presença deste fenômeno quando tentamos aproximar a função não periódica $f(x) = x$ por uma expansão em série de Fourier.

3.3 A Transformada Discreta de Fourier (TDF)

Seja N um inteiro positivo (na prática, uma potência de 2 pelo que veremos mais adiante) e u_n uma sequência de números complexos correspondentes aos pontos nodais $x_n = 2(n-1)/N$, onde $n = 1, 2, \dots, N$. Então, sua Transformada Discreta de Fourier (TDF) é outra sequência de números complexos dada por

$$\tilde{u}_k = \sum_{n=1}^N u_n e^{-i(k-1)x(n)} \quad (3.1)$$

para $k = 1, 2, \dots, N$.

São várias as definições encontradas para representar a TDF. Neste trabalho vamos considerar a representação acima apresentada, assumindo que N é potência de 2. A escolha de N ímpar também é possível, e neste caso, existe uma versão análoga que pode ser aplicada.

Proposição 1 (Relação de ortogonalidade discreta): Seja P um inteiro qualquer. Então

$$\sum_{n=P}^{P+N-1} \exp(i 2 \pi n j / N) \exp(-i 2 \pi n k / N) = N \hat{\delta}_N(j - k),$$

onde $\hat{\delta}_N(k)$ é igual a 1 se k é nulo ou um múltiplo de N , e igual a 0 caso contrário.

Devido a Proposição 1 (ver, por exemplo, Briggs e Henson, 1995), a transformada discreta de Fourier inversa (TDFI) é a seguinte sequência de números complexos

$$u_n = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k e^{-ik x(n)} \quad (3.2)$$

para $n = 1, 2, \dots, N$.

Isso permite-nos definir o polinômio $I_N u(x)$ como

$$I_N u(x) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k e^{-ik x},$$

que denominados de **interpolante trigonométrico de $u(x)$** nos pontos $x(n)$.

A transformada de Fourier discreta é empregada para obter soluções aproximadas para equações diferenciais. Em termos gerais, aplica-se a transformada de Fourier a

equação diferencial de modo a transformá-la em uma equação diferencial ordinária (no tempo, geralmente) ou em uma equação algébrica. Esta equação é resolvida numericamente ou analiticamente e então aplica-se a transformada de Fourier inversa para obter uma aproximação para a solução da equação original. A transformada discreta é justamente a transformada efetivamente calculada computacionalmente, que aproxima a transformada de Fourier contínua na formulação do problema discreto associado à formulação contínua.

Um estudo detalhado sobre a transformada discreta de Fourier pode ser encontrado em Briggs e Henson (1995).

3.4 Diferenciação por Fourier-Galerkin ou por Colocação

Denominados **derivada de Fourier-Galerkin** de uma função u , D_N^{FG} , à função $P_N u(x)'$. É fato que $P_N u' = (P_N u)'$. Como na prática não temos os coeficientes de Fourier exatos da função u , definimos a derivada de Fourier-colocação: $D_N^{FC} u := (I_N u)'$. Neste caso, tem-se que $D_N^{FC} u \neq I_N u'$ e $D_N^{FC} u \neq D_N^{FG} u$. Se a função u for infinitamente diferenciável e periódica juntamente com todas as suas derivadas, isto é $u \in C_{per}^\infty(R)$, então as derivadas citadas são excelentes aproximações para a verdadeira derivada de $u(x)$.

3.5 Transformada Rápida de Fourier (TRF)

Até o momento, apresentamos as definições da TDF, sem nos preocuparmos com procedimento de cálculo computacional. Este procedimento é conhecido como a transformada rápida de Fourier (FFT do inglês Fast Fourier Transform). O sentido de “rápida” significa que o algoritmo requer um custo computacional praticamente ótimo: a forma mais simples de FFT requer que N seja uma certa potência de 2 e envolve $5N \log_2 N - 6N$ operações reais, onde adições e multiplicações são consideradas como operações separadas (uma soma direta requer $8N^2$ operações reais). Existem extensões do algoritmo para os casos que N não é igual a uma potência de 2, porém a economia atingida não é tão drástica quanto no caso $N = 2^M$.

Embora em essência já fosse conhecida por Gauss e outros pesquisadores que o sucederam, a primeira versão algorítmica publicada da FFT, teve como autores dois pesquisadores da IBM chamados John Tukey e James Cooley em 1965. Desde então, o método original de Cooley-Tukey foi refinado e modificado para uma variedade de arquiteturas de computador. Para mais detalhes, sugere-se Temperton(1983) ou Van Loan (1992).

Capítulo 4

O Método de Fourier-Gegenbauer

Resumo: Este capítulo trata do tema central deste trabalho, o método de Fourier-Gegenbauer. Apresentamos as idéias centrais e o teorema de Gottlieb, Shu, Solomonoff e Vandeven, que originou o método (versão Galerkin) desenvolvido neste trabalho para resolver equações diferenciais.

Gottlieb e co-autores (1992) descreveram uma metodologia para eliminar o fenômeno de Gibbs presentes em expansões em séries de Fourier ou Gegenbauer de funções descontínuas e analítica por partes definidas no domínio $[-1, 1]$, denominada Método de Fourier-Gegenbauer (MFG).

No presente trabalho, aplicamos o MFG proposto naquele trabalho para resolver aproximadamente equações diferenciais de interesse no desenvolvimento de métodos para tratar as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis. Iniciamos com o caso unidimensional ilustrado naquele trabalho: aproximar com acurácia espectral uma função analítica e não periódica $f(x)$ definida em $x \in [-1, 1]$, representada por sua série de Fourier. Obtem-se aqui uma representação em série de Gegenbauer para $f(x)$ sem fenômeno de Gibbs nos contornos do domínio. Em seguida passamos a explorar a extensão desta técnica à resolução computacional de equações diferenciais (parabólicas, hiperbólicas e elípticas), obtendo convergência uniforme e espectral na representação de Gegenbauer.

4.1 Uma Introdução à versão por Galerkin do MFG

Nesta seção, descrevemos o MFG proposto por Gottlieb e co-autores (1992). Considere uma função analítica mas não periódica $f(x)$ definida em $x \in [-1, 1]$. A função tem descontinuidades nos contornos $x = \pm 1$ se ela é estendida periodicamente com período 2. Os coeficientes de Fourier são definidos por

$$\hat{f}_k = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(x) e^{-ik\pi x} dx. \quad (4.1)$$

Assumimos que os $2N+1$ coeficientes de Fourier \hat{f}_k são dados mas a função $f(x)$ não. O objetivo é recuperar a função $f(x)$ em $x \in [-1, 1]$ com acurácia espectral na norma do máximo. A série de Fourier truncada para as funções descontínuas $f(x)$

$$f_N(x) = \sum_{k=-N}^N \hat{f}_k e^{ik\pi x}, \quad (4.2)$$

converge lentamente, com o erro da ordem de $(\frac{1}{N})$ dentro do intervalo, e exibe oscilações espúrias perto dos contornos $x = \pm 1$. Este comportamento é conhecido como o fenômeno de Gibbs. Logo, não há convergência na norma do máximo.

A idéia principal proposta por Gottlieb e co-autores (1992) consiste em re-expandir a série dada em (4.2) em uma série de Gegenbauer convergente.

A representação da função f em uma série por polinômios de Gegenbauer é denotada por

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{f}^\lambda(l) C_l^\lambda(x), \quad (4.3)$$

onde \hat{f}^λ são os coeficientes de Gegenbauer definidos por

$$\hat{f}^\lambda(l) = \frac{1}{h_l^\lambda} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-1/2} f(x) C_l^\lambda(x) dx. \quad (4.4)$$

O fator de normalização h_l^λ é dado por

$$h_l^\lambda = \pi^{1/2} C_l^\lambda(1) \frac{\Gamma(\lambda + 1/2)}{\Gamma(\lambda)(l + \lambda)}. \quad (4.5)$$

A seguinte expressão é empregada para avaliar os polinômios de Gegenbauer $C_l^\lambda(x)$:

$$C_l^\lambda(\cos \theta) = \sum_{k=0}^l \frac{\Gamma(k + \lambda) \Gamma(l - k + \lambda)}{k! \Gamma(\lambda) (l - k)! \Gamma(\lambda)}, \quad (4.6)$$

onde Γ é a função Gamma.

Não conhecemos a função $f(x)$, mas sim sua série de Fourier truncada definida em (4.2), podemos apenas conseguir uma aproximação para $\hat{f}^\lambda(l)$, que denotamos por

$$\hat{g}^\lambda(l) = \frac{1}{h_l^\lambda} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-1/2} f_N(x) C_l^\lambda(x) dx. \quad (4.7)$$

A existência de uma forma fechada para a integral de uma exponencial por um polinômio de Gegenbauer, permite obtermos uma representação explícita para os coeficientes de Gegenbauer $\hat{g}^\lambda(l)$ em função dos coeficientes de Fourier $\hat{f}(k)$:

$$\hat{g}^\lambda(l) = \delta_{0l} \hat{f}(0) + \Gamma(\lambda) i^l (l + \lambda) \sum_{0 < |k| \leq N} J_{l+\lambda}(\pi k) \left(\frac{2}{\pi k} \right)^\lambda \hat{f}(k) \quad (4.8)$$

($J_v(x)$ é a função de Bessel de 1ª espécie de ordem zero). Uma vez obtidos os coeficientes de Gegenbauer $\hat{g}^\lambda(l)$, podemos aproximar $f(x)$ por

$$g_m^\lambda = \sum_{l=0}^m \hat{g}^\lambda(l) C_l^\lambda(x). \quad (4.9)$$

Análise do Erro

E_G = erro global

E_T = erro de truncamento

E_R = erro de regularização

$$E_G \leq E_T + E_R$$

$$E_G = \max_{-1 \leq x \leq 1} \left| f(x) - \sum_{l=0}^m \hat{g}^\lambda(l) C_l^\lambda(x) \right|$$

onde

$$\hat{g}^\lambda(l) = \frac{1}{h_l^\lambda} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-1/2} f_N(x) C_l^\lambda(x) dx$$

$$E_R = \max_{-1 \leq x \leq 1} \left| f(x) - \sum_{l=0}^m \hat{f}^\lambda(l) C_l^\lambda(x) \right|$$

onde

$$\hat{f}^\lambda(l) = \frac{1}{h_l^\lambda} \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\lambda-1/2} f(x) C_l^\lambda(x) dx$$

$$E_T = \max_{-1 \leq x \leq 1} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \hat{f}^{\lambda}(l) C_l^{\lambda}(x) - \sum_{l=0}^m \hat{g}^{\lambda}(l) C_l^{\lambda}(x) \right|$$

E_T : erro entre os coeficientes de Gegenbauer exatos e os coeficientes de Gegenbauer da série de Fourier truncada de $f(x)$ aproximada.

E_R : erro entre a função dada e os coeficientes de Gegenbauer da série de Fourier truncada de $f(x)$ exata.

Em suma, a idéia proposta por Gottlieb e co-autores (1992) é recuperar f , com acurácia espectral na norma do máximo, a partir dos conhecidos coeficientes de Fourier $\hat{f}(k)$. Isto é realizado através de uma expansão em polinômios de Gegenbauer em que os coeficientes são obtidos dos coeficientes de Fourier $\hat{f}(k)$. Assim, chegamos ao principal teorema de Gottlieb e co-autores (1992).

Teorema 1 (*Eliminação do fenômeno de Gibbs*): *Considere uma função analítica e não-periódica $f(x)$, definida sobre o intervalo $[-1, 1]$, que satisfaz*

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} \left| \frac{d^k}{dx^k} f(x) \right| \leq C(\rho) \frac{k!}{\rho^k}, \quad \rho \geq 1. \quad (4.10)$$

Assume que os coeficientes de Fourier dados por (4.1) são conhecidos para $-N \leq k \leq N$. Seja $\hat{g}^{\lambda}(l)$, $0 \leq l \leq m$, os coeficientes de expansão de Gegenbauer de $f_N(x)$ dada por (4.8). Então para $\lambda = m = \beta N$, onde $\beta < \frac{2}{27}\pi e$

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} \left| f(x) - \sum_{l=0}^m \hat{g}^{\lambda}(l) C_l^{\lambda}(x) \right| \leq AN^2 q_T^N + \tilde{A} q_R^N, \quad (4.11)$$

onde $q_T = \left(\frac{27\beta}{2\pi e}\right)^{\beta} < 1$, $q_R = \left(\frac{27}{32\rho}\right)^{\beta} < 1$, $\rho(\geq 1)$ e A e \tilde{A} são constantes.

Neste trabalho estamos interessados na utilização de séries de Fourier exponenciais para conseguir os coeficientes de Gegenbauer. Mas existem outros esquemas de FG que utilizam outros procedimentos, como podemos encontrar em Gottlieb e Shu (1995a), que utiliza os polinômios de Chebyshev e Legendre, para um subintervalo $[a, b] \subset [-1, 1]$. Assim como encontramos em outro paper de Gottlieb e Shu (1995b), um método para conseguir acurácia exponencial em todos os pontos, incluindo as descontinuidades, utilizando pontos de colocação de Gauss.

4.2 Extensões do MFG

Para resolvermos equações diferenciais em duas dimensões, é preciso estender o teorema enunciado por Gottlieb e co-autores (1992), apresentado na seção anterior. A seguir apresentamos o procedimento empregado por Oliveira e Silva (1999).

Considere a função $f \in L_2([-1, 1]^2)$. Assumimos que os $(2N+1) \times (2M+1)$ coeficientes de Fourier $\hat{f}(k, s)$ são conhecidos. Portanto, os primeiros $(n+1) \times (m+1)$ coeficientes de Gegenbauer de $f_{N,M}(x, y)$ dados por

$$f_{N,M}(x, y) = \sum_{s=-M}^M \sum_{k=-N}^N \hat{f}(k, s) \varphi_k(x) \varphi_s(y) \quad (4.12)$$

onde $\varphi_k(x) := e^{ik\pi x}$ e $\varphi_s(y) := e^{is\pi y}$, são calculados através da seguinte fórmula

$$\begin{aligned} \hat{g}^{\lambda_x, \lambda_y}(j, k) = & \sum_{0 < |n| \leq N}^N \sum_{0 < |m| \leq M}^M \left\{ \hat{f}(n, m) \Gamma(\lambda_x) v^j(j + \lambda_x) J_{j+\lambda_x}(\pi n) \left(\frac{2}{\pi n} \right)^{\lambda_x} \right\} \\ & \times \left\{ \Gamma(\lambda_y) v^k(k + \lambda_y) J_{k+\lambda_y}(\pi m) \left(\frac{2}{\pi m} \right)^{\lambda_y} \right\} + \\ & \sum_{0 < |n| \leq N} \left\{ \hat{f}(n, 0) \delta_{0,k} \Gamma(\lambda_x) v^j(j + \lambda_x) J_{j+\lambda_x}(\pi n) \left(\frac{2}{\pi n} \right)^{\lambda_x} \right\} + \\ & \sum_{0 < |m| \leq M} \left\{ \hat{f}(0, m) \delta_{0,j} \Gamma(\lambda_y) v^k(k + \lambda_y) J_{k+\lambda_y}(\pi m) \left(\frac{2}{\pi m} \right)^{\lambda_y} \right\} + \\ & \hat{f}(0, 0) \delta_{0,j} \delta_{0,k} \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde $\lambda_x = \alpha_x N$, $\lambda_y = \alpha_y M$, $m = \beta_x M$, $n = \beta_y N$, e $\alpha_x, \alpha_y, \beta_x, \beta_y$ são números positivos, escolhidos de forma similar como mostra o teorema, isto é, o erro decai espectralmente. O teorema estendido bem como sua demonstração foram propostos originalmente por Gelb e Gottlieb (1997).

Capítulo 5

Estudo de Problemas-Modelo, Apresentação e Discussão da Metodologia

Resumo: Neste capítulo apresentamos vários problemas-modelo em ordem crescente de complexidade e descrevemos em paralelo as metodologias computacionais desenvolvidas para resolvê-los visando aplicações futuras em problemas de mecânica dos fluidos. O capítulo também contém várias comparações entre procedimentos propostos no presente trabalho com os métodos existentes na literatura.

5.1 Aproximação de Funções

A aproximação de funções periódicas suaves (C^∞ ou analítica) por séries de Fourier possui erro de aproximação tendendo a zero a uma taxa pelo menos mais rápida que qualquer potência inversa de N , onde N é o número de termos da série aproximante. Entretanto, problemas que envolvem condições de contorno não periódicas podem ser resolvidos com acurácia espectral desde que a escolha das funções de base seja adequada (por exemplo, Chebyshev).

Ao utilizarmos séries de Fourier em problemas não periódicos teremos a presença do fenômeno de Gibbs. Gottlieb e co-autores (1992) apresentam uma metodologia para

eliminar o fenômeno de Gibbs de representações em série de Fourier. Para ilustrar o fenômeno, reproduzimos o exemplo utilizado pelos mesmos que consiste em aproximar a função $f(x) = x$ no domínio $\Omega = [-1, 1]$. Neste exemplo, a soma parcial de Fourier apresenta oscilações espúrias próximo aos contornos. Estas oscilações são removidas aplicando o método de Fourier-Gegenbauer, como mostra a figura 5.1. Na tabela 5.1 verificamos o erro máximo para a aproximação de Fourier e de Fourier-Gegenbauer. A figura 5.2 mostra que a taxa de convergência dos coeficientes de Fourier é bastante lenta, $O(\frac{1}{N})$, em decorrência do fenômeno de Gibbs.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.90E-1	2.72E-2	1.4E-3	9.67E-6	6.92E-10
$\ e\ _{\infty}^F$	2.12	2.06	2.03	2.01	2.00

Tabela 5.1: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N para $f(x) = x$ ($\alpha = \beta = 0.25$).

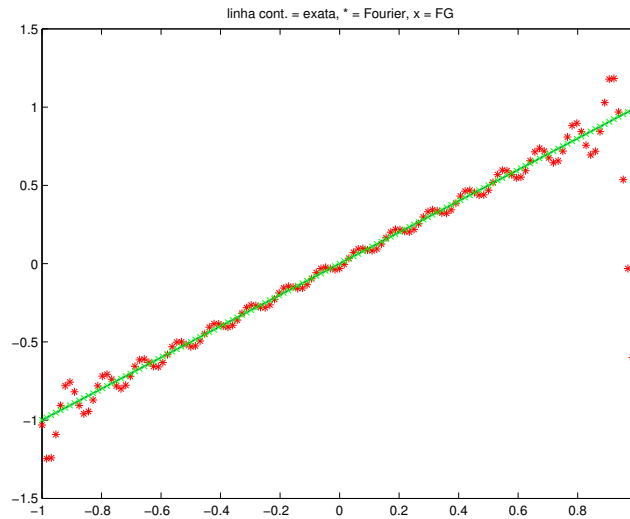


Figura 5.1: Aproximação de $f(x) = x$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=32$ ($\alpha = \beta = 0.25$).

Na figura 5.3 observamos a rápida convergência dos coeficientes de Fourier-Gegenbauer até um determinado valor de N . Teoricamente, quando maior N , melhor a con-

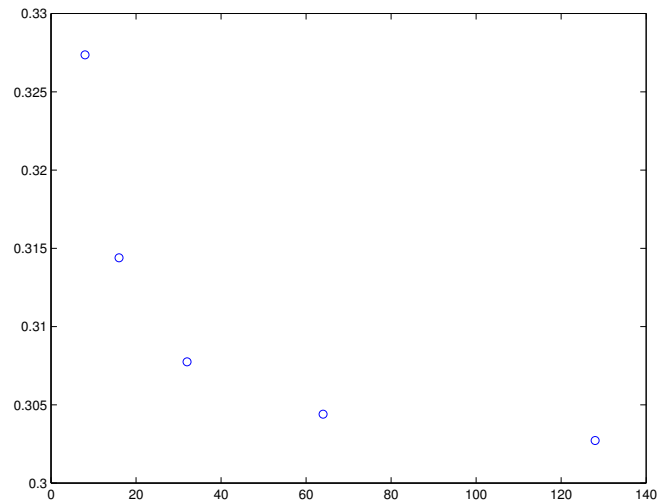


Figura 5.2: Ordem de convergência dos coeficientes de Fourier. $\log_{10} \text{erro}$ em função de N .

vergência. Na prática o que ocorre é que a medida que aumentamos N temos problemas com os erros de arredondamento. Estes erros tem origem no cálculo dos coeficientes de Gegenbauer, calculados a partir dos coeficientes de Fourier, pois estes envolvem o cálculo de funções Gamma e Bessel (veja equação 4.8).

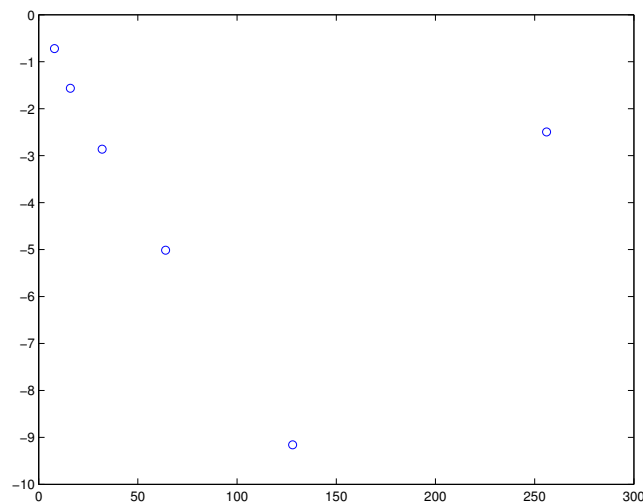


Figura 5.3: Ordem de convergência dos coeficientes de Fourier-Gegenbauer. $\log_{10} \text{erro}$ em função de N .

Quando aproximamos uma função periódica infinitamente diferenciável ou analítica utilizando séries de Fourier, o fenômeno de Gibbs não ocorre pois não há descontinuidades na função (ou em suas derivadas). Obtemos rápida convergência, como mostra a tabela 5.2 e a figura 5.4. Neste caso, o método de Fourier-Gegenbauer não é necessário.

N	8	16	32	64
$\ e\ _{\infty}^F$	1.97E-1	5.00E-4	2.12E-11	9.49E-15

Tabela 5.2: Erro máximo da aproximação de Fourier em função de N para $f(x) = \sin(\pi \cos(x))$ ($\alpha = \beta = 0.25$).

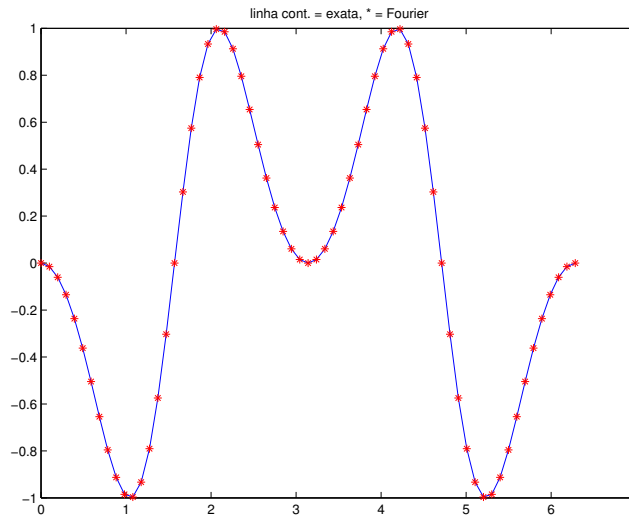


Figura 5.4: Aproximação de Fourier para $f(x) = \sin(\pi \cos(x))$ com N=16.

Para atenuar os efeitos do fenômeno de Gibbs, é comum o uso de “filtros” (Gottlieb e Shu (1997)), mas o teorema 1 do capítulo anterior contribuiu muito nas aplicações onde o fenômeno estava presente. A partir deste teorema é possível eliminar por completo o fenômeno e atingir acurácia espectral com os Métodos de Fourier.

5.1.1 Metodologia

Metodologia utilizada na aproximação de funções não periódicas:

1. Avaliar a função no intervalo de interesse;
2. Calcular os coeficientes de Fourier da função;
3. Calcular os coeficientes de Gegenbauer, a partir dos coeficientes de Fourier;
4. Calcular numericamente a aproximação por polinômios de Gegenbauer;
5. Calcular a aproximação por Fourier (para comparação);
6. Avaliar se a sequência de aproximações obtidas converge à função a ser aproximada;
7. Avaliar se a sequência de aproximações converge à taxa desejada.

Para aproximar uma função periódica, basta seguir os passos anteriores exceto os passos (3) e (4).

Nas próximas seções apresentamos a resolução de equações diferenciais, unidimensionais e bidimensionais, utilizando o método de Fourier-Gegenbauer.

5.2 Aplicação a Equações Diferenciais 1-D

5.2.1 Problema-modelo 1

Considere a equação de Poisson, com condições de contorno homogêneas de Dirichlet no domínio $\Omega = (-1, 1)$

$$-\frac{d^2 u}{dx^2} = f(x), \quad (5.1)$$

$$u(-1) = u(1) = 0$$

$u(x)$ exata é dada por

$$u(x) = \exp(1) - \exp(x^2)$$

e o forçante é

$$f(x) = \exp(x^2) (2 + 4x^2)$$

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

A fim de construir uma aproximação de Fourier para este problema, aplicamos a transformada de Fourier em (5.1):

$$\hat{u}_k = \frac{(-1)^{k+1} \mu_0}{k^2 \pi^2} + \frac{\hat{f}_k}{k^2 \pi^2} \quad k \neq 0 \quad (5.2)$$

onde

$$\mu_0 = \frac{u'(1) - u'(-1)}{2}$$

Integrando a equação diferencial, obtemos:

$$\mu_0 = -\hat{f}_0 \quad (5.3)$$

Calculamos (aproximadamente) \hat{u}_0 impondo as condições de contorno $u(\pm 1) = 0$ na aproximação de u :

$$u(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2} \hat{u}_k e^{ik\pi x} \quad (5.4)$$

Então,

$$\hat{u}_0 = - \sum_{0 < |k| \leq N/2} \hat{u}_k (-1)^k \quad (5.5)$$

As equações (5.2), (5.3) e (5.5) permitem-nos avaliar diretamente os coeficientes de Fourier. Calculamos μ , \hat{u}_k e \hat{u}_0 nesta ordem.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.13	2.37E-1	6.94E-2	3.39E-2	1.71E-2
$\ e\ _{\infty}^F$	3.23E-1	1.71E-1	8.80E-2	4.46E-2	2.25E-2

Tabela 5.3: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$).

Observa-se na tabela 5.3 que o erro não apresenta um rápido decaimento com N . Isso deve-se primordialmente à lenta convergência da série e aos erros de arredondamento no cálculo de \hat{u}_0 . Ao substituirmos (5.2) e (5.3) em (5.5), e usando o fato de que

$$\sum_1^{\infty} \frac{1}{k^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

obtemos uma expressão para o coeficiente fundamental de Fourier \hat{u}_0 em termos dos coeficientes de Fourier do forçante f :

$$\hat{u}_0 = - \sum_{0 < |k| \leq N/2} \frac{(-1)^k \hat{f}_k}{k^2 \pi^2} + \frac{\hat{f}_0}{3} \quad (5.6)$$

Como \hat{u}_0 é calculado impondo-se as condições de contorno, esta segunda forma elimina problemas associados a perda de precisão por cancelamentos subtrativos e a convergência lenta da série que aproxima \hat{u}_k . Conforme mostra a tabela 5.4, recuperamos a convergência espectral. Para o mesmo problema, aplicamos o método espectral via polinômios de Chebyshev conseguindo a convergência desejada com 16 termos da série.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.39	3.68E-1	8.39E-2	2.0E-3	2.82E-6
$\ e\ _{\infty}^F$	2.56E-1	1.31E-1	6.70E-2	3.39E-2	1.71E-2
$\ e\ _{\infty}^C$	3.5E-3	6.12E-9	8.88E-16		

Tabela 5.4: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$) e em polinômios de Chebyshev.

Os métodos espectrais “puros” com polinômios de Chebyshev apresentam acurácia superior ao método de Fourier-Gegenbauer (para um mesmo N , por exemplo), porém restringem excessivamente o passo no tempo em esquemas temporais. A condição de estabilidade numérica é função do menor espaçamento entre os pontos nodais, ou seja, adensamento de pontos próximo ao contorno nos métodos espectrais-Chebyshev, causa fortes limitações no passo temporal. Isto implica em um maior custo computacional e justifica o método de Fourier-Gegenbauer.

5.2.2 Problema-modelo 2

Considere a equação de Helmholtz com condições de contorno homogêneas de Dirichlet no domínio $\Omega = (-1, 1)$

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + \mu^2 u = f(x), \quad (5.7)$$

$$u(-1) = u(1) = 0$$

para valores reais de μ

$$u(x) = \exp(1) - \exp(x^2)$$

$$f(x) = \exp(x^2) (2 + 4x^2) + \mu^2 u(x)$$

Formulação Proposta por Vozovoi e co-autores (1997)

O método proposto por Vozovoi e co-autores para resolver esta equação diferencial consiste dos seguintes passos:

Passo 1: A transformada de Fourier é aplicada a equação (5.7) obtendo-se os coeficientes \hat{u}_k

$$\hat{u}_k = -\frac{\hat{f}_k}{k^2\pi^2 + \mu^2} \quad (k = -N, -N+1, \dots, N) \quad (5.8)$$

A solução particular u_p resultante não satisfaz as condições de contorno. Neste caso, faz-se uma correção:

Passo 2: A correção da solução particular é feita adicionando duas soluções homogêneas linearmente independentes de (5.7)

$$u(x) = u_p(x) + h_1(x) + h_2(x),$$

onde

$$h_1(x) = \alpha \exp(\mu x)$$

$$h_2(x) = \beta \exp(-\mu x)$$

e os coeficientes α e β são determinados pelas condições de contorno da equação (5.7), ou seja,

$$h_1(-1) + h_2(-1) = -u_p(-1),$$

$$h_1(1) + h_2(1) = -u_p(1).$$

A solução particular u_p é \hat{u}_k pós-processado por Fourier-Gegenbauer e $u_p(\pm 1)$ é o resultado da expansão em polinômios de Gegenbauer nos pontos (-1) e (1). Calculados α e β , soma-se $\alpha G(\exp(\mu x)) + \beta G(\exp(-\mu x))$ a solução particular u_p . Onde $G(\exp(\pm \mu x))$ é a aproximação de Fourier-Gegenbauer das funções $\exp(\mu x)$ e $\exp(-\mu x)$. A soma destes termos a solução particular é necessária pois para valores grandes de μ , a solução torna-se ruim.

Os resultados da implementação do método de Vozovoi estão na tabela a seguir.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.31	3.60E-1	8.39E-2	2.0E-3	1.58E-5
$\ e\ _{\infty}^F$	2.44E-1	1.14E-1	4.26E-2	4.94E-2	6.13E-2

Tabela 5.5: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), com $\mu = 80$.

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Aplicamos a transformada de Fourier em (5.7), obtemos os coeficientes \hat{u}_k

$$\hat{u}_k = \frac{\hat{f}_k + (-1)^k \mu_0}{k^2 \pi^2 + \mu^2} \quad (k \neq 0) \quad (5.9)$$

onde

$$\mu_0 = \frac{u'(1) - u'(-1)}{2}$$

Integrando (5.7) obtemos o coeficiente fundamental \hat{u}_0 :

$$\mu_0 + \mu^2 \hat{u}_0 = \hat{f}_0 \quad (5.10)$$

Como μ_0 também não é conhecido, impomos as condições de contorno:

$$\hat{u}_0 = - \sum_{0 < |k| \leq N/2} \hat{u}_k (-1)^k \quad (5.11)$$

Para resolver este sistema, substituímos (5.9) e (5.10) em (5.11) e calculamos o valor de μ_0 . Depois calculamos \hat{u}_k e por fim \hat{u}_0 .

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.20	2.37E-1	5.74E-2	3.21E-2	1.71E-2
$\ e\ _{\infty}^F$	3.14E-1	1.68E-1	8.85E-2	3.61E-2	1.86E-2

Tabela 5.6: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), com $\mu = 1$.

Observa-se na tabela 5.6 que não atingimos convergência espectral para $\mu = 1$. Se, no entanto, incorporamos a correção proposta por Vozovoi e co-autores em nossa formulação não convergente e aumentarmos o valor de μ , atingimos uma acurácia um pouco melhor comparando com a tabela 5.5.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.31	3.60E-1	8.39E-2	2.0E-3	7.69E-6
$\ e\ _{\infty}^F$	2.03E-1	1.13E-1	6.17E-2	3.40E-2	1.88E-2

Tabela 5.7: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), $\mu = 80$.

Na metodologia proposta no presente trabalho, aplicando o resultado do problema modelo 1, considerando que neste caso o forçante é igual a $f - \mu^2 u$, recupera-se novamente o decaimento espectral do erro. Ao fazer algumas manipulações algébricas, a partir das equações anteriores, obtemos uma nova equação da forma:

$$(3 + \mu^2) \hat{u}_0 = \hat{f}_0 + \frac{3}{\pi^2} \sum_{0 < |k| \leq N/2} (-1)^{k+1} \left(\frac{\hat{f}_k - \mu^2 \hat{u}_k}{k^2} \right) \quad (5.12)$$

substituindo (5.9) e (5.10) em (5.12), obtemos uma nova equação para \hat{u}_0 :

$$\omega_1 \hat{u}_0 = \hat{f}_0 \omega_2 + \frac{3}{\pi^2} \left(\sum_{0 < |k| \leq N/2} (-1)^{k+1} \frac{\hat{f}_k}{k^2} \left(1 - \frac{\mu^2}{\mu^2 + k^2 \pi^2} \right) \right) \quad (5.13)$$

onde

$$\omega_2 := 1 - \left(\frac{3}{\pi^2} \sum_{0 < |k| \leq N/2} \frac{\mu^2}{(\mu^2 + k^2 \pi^2) k^2} \right)$$

$$\omega_1 := 3 + \mu^2 \omega_2$$

Logo, calculamos \hat{u}_0 , μ_0 e \hat{u}_k nesta ordem. A tabela 5.8 apresenta o erro máximo na solução em função do número de termos da série. A aproximação pode ser visualizada na figura 5.5. Observa-se que o procedimento que adotamos resulta em um decaimento mais acentuado do erro quando comparado a correção proposta por Vozovoi.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.38	3.68E-1	8.38E-2	2.0E-3	1.85E-6
$\ e\ _{\infty}^F$	7.82E-2	1.88E-2	2.11E-2	2.29E-2	1.52E-2

Tabela 5.8: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$), $\mu = 80$.

Vozovoi e co-autores (1997) discutem sobre a distorção da solução quando aumentamos o valor de μ na equação (5.7). Mas se observarmos o método proposto por eles, quando aplicamos a transformada de Fourier na equação (5.7), os termos que aparecem nos contornos são desprezados. Desta forma, é preciso corrigir a solução final, conforme apresentado anteriormente. Comparando com a metodologia apresentada nesta dissertação, estes termos que aparecem nos contornos quando aplicamos Fourier, são tratados e por isso conseguimos convergência espectral na solução final, sem a necessidade de correções. Conseqüentemente, se aumentarmos o valor de μ , a convergência não sofre mudanças significativas. Os resultados podem ser visualizados na tabela 5.9.

Já no método proposto por Vozovoi e co-autores, o erro sofre mudanças significativas para certos valores de μ , como podemos ver na tabela 5.10.

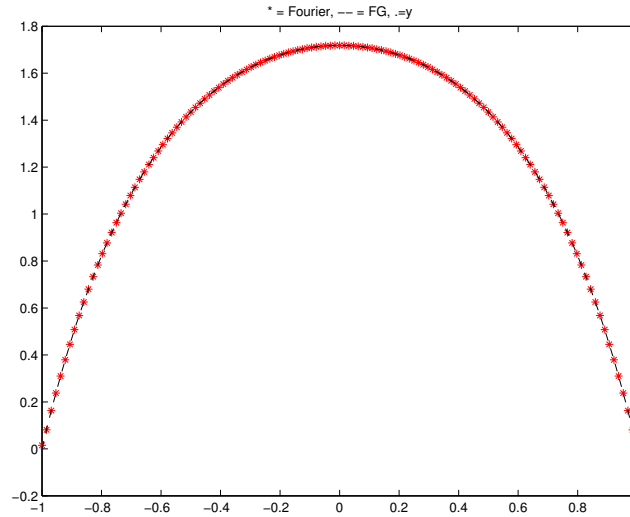


Figura 5.5: Aproximação de $u(x)$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=128$, $(\alpha = \beta = 0.25)$, $\mu = 80$.

μ	$\ e\ _{\infty}^{FG}$	μ	$\ e\ _{\infty}^{FG}$
0.01	2.82E-6	30	4.21E-5
0.1	2.81E-6	40	2.06E-5
0.5	2.66E-6	50	8.38E-6
1	2.35E-6	60	3.82E-6
5	2.38E-6	80	1.85E-6
10	1.31E-5	100	1.65E-6
20	4.51E-5	200	1.63E-6

Tabela 5.9: Erro máximo nas aproximações de Fourier-Gegenbauer em função de μ com $N=128$. Metodologia proposta neste trabalho.

A solução escolhida para o problema naquele trabalho ($u(x) = x$) é muito simples, a derivada da função é zero, e, portanto, não apresenta gradientes fortes. Neste caso, foi necessário implementar a metodologia proposta naquele trabalho para o problema modelo apresentado nesta seção.

μ	$\ e\ _{\infty}^{FG}$	μ	$\ e\ _{\infty}^{FG}$
0.01	1.80E-7	30	3.90E-2
0.1	1.80E-7	40	1.03E-2
0.5	1.73E-7	50	2.00E-3
1	1.59E-7	60	3.80E-4
5	4.59E-7	80	1.58E-5
10	4.59E-7	100	3.88E-7
20	4.30E-2	200	1.60E-6

Tabela 5.10: Erro máximo nas aproximações Fourier-Gegenbauer em função de μ com $N=128$. Metodologia proposta por Vozovoi e co-autores.

5.2.3 Problema-modelo 3

Considere a seguinte equação diferencial parcial hiperbólica (Equação da onda):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = x + t, \quad 0 < x < \pi, \quad (5.14)$$

$$u(0, t) = 0, \quad t \geq 0$$

$$u(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq \pi.$$

A solução exata é $u = xt$.

Para discretização no tempo, resolvemos pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem, e na resolução espacial utilizamos o método de Fourier-Gegenbauer.

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Como o domínio é $(0, \pi)$ efetuamos uma mudança de variável para mapear o intervalo original no intervalo $(-1, 1)$ da seguinte forma:

$$x_m = \left(\frac{b+a}{2} \right)$$

$$x_l = \left(\frac{b-a}{2} \right)$$

$$x = x_m + z * x_l$$

onde, $a \leq x \leq b$ e $-1 \leq z \leq 1$. Então obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{x_l} \frac{\partial u}{\partial z} = x_m + (x_l * z) + t, \quad -1 < z < 1. \quad (5.15)$$

Aplicamos a transformada de Fourier em (5.15):

$$\hat{u}'_k = \hat{f}_k - \frac{ik\pi}{x_l} \hat{u}_k, \quad k \neq 0 \quad (5.16)$$

Pelas condições de contorno,

$$\hat{u}_0 = - \sum_{0 < |k| \leq N/2} \left((-1)^k \frac{\hat{f}_k - \hat{u}'_k}{ik\pi} x_l \right) \quad (5.17)$$

ou seja,

$$\hat{u}_0 = - \sum_{0 < |k| \leq N/2} \left((-1)^k \frac{\hat{f}_k - faux_k}{ik\pi} x_l \right) \quad (5.18)$$

Novamente temos o problema da perda de precisão por cancelamento subtrativo no cálculo de \hat{u}_0 e a lenta convergência da série, conforme ilustra a tabela 5.11, onde apresentamos o erro máximo obtido em função do número de termos da série.

N	8	16	32	64
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	7.0E-3	5.5E-3	5.0E-3	5.0E-3
$\ e\ _{\infty}^F$	3.05E-1	3.02E-1	2.95E-1	2.82E-1

Tabela 5.11: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$).

A fim de recuperar a taxa exponencial de convergência, integramos a equação da onda, obtendo \hat{u}_0 em forma fechada.

$$\hat{u}_0 = \frac{t^2}{2}.$$

Na tabela 5.12 e na figura 5.6, apresentamos os resultados correspondentes, que atestam a recuperação da acurácia desejada. A tabela corresponde ao erro obtido para $t = 0.1$. Escolhemos t pequeno neste exemplo para que o erro na solução da EDO pelo

método de Runge-Kutta fosse desprezível quando comparado ao erro na discretização espacial (empregamos $\Delta t = 10^{-2}$).

N	8	16	32	64
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	1.89E-3	8.85E-5	4.35E-7	1.75E-11
$\ e\ _{\infty}^F$	1.82E-1	9.83E-2	3.63E-2	2.10E-2

Tabela 5.12: Erro máximo entre aproximações de Fourier e Fourier-Gegenbauer em função de N ($\alpha = \beta = 0.25$) para $t = 0.1$.

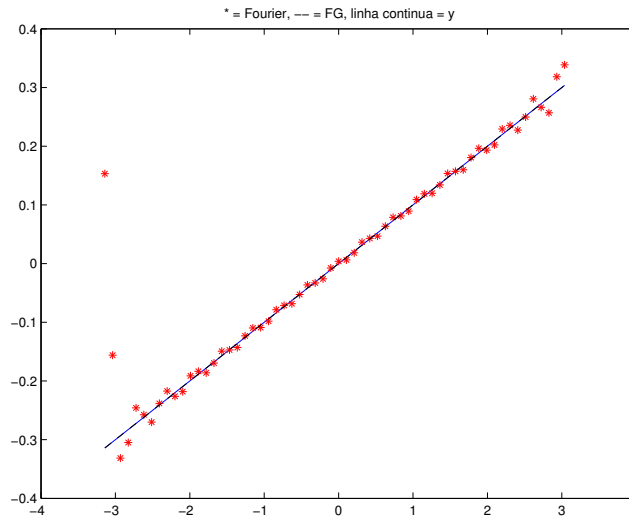


Figura 5.6: Aproximação de $u(x)$ por Fourier e por Fourier-Gegenbauer com $N=32$ ($\alpha = \beta = 0.25$).

Estes exemplos mostram que o método de Fourier-Gegenbauer para soluções de equações diferenciais é sensível aos erros de arredondamento ou à convergência lenta das aproximações dos coeficientes de Fourier. Tais fatores podem degradar completamente a acurácia final do método.

5.2.4 Metodologia

Metodologia, e suas variações, para resolver equações diferenciais unidimensionais:

1. Aplicar o método de Fourier clássico à equação diferencial, resolvendo-a no espaço transformado, onde o problema se reduz a solução de equações algébricas;
2. Avaliar o forçante no intervalo de interesse;
3. Calcular os coeficientes de Fourier do forçante;
4. Resolver a EDO, usando as equações obtidas no passo (1), calculando os coeficientes da aproximação \hat{u}_k ;
5. Impor as condições de contorno, calculando o coeficiente \hat{u}_0 . Este coeficiente deve ser calculado de forma a evitar a degradação da acurácia final desejada;
6. Calcular os coeficientes de Gegenbauer, a partir dos coeficientes de Fourier;
7. Calcular numericamente a aproximação por polinômios de Gegenbauer;
8. Calcular a aproximação por Fourier (para comparação);
9. Avaliar se a seqüência de aproximações obtidas converge à solução do problema;
10. Avaliar se a seqüência de aproximações converge à taxa desejada.

Metodologia para problemas no tempo:

1. Aplicar o método de Fourier clássico à equação diferencial, resolvendo-a no espaço transformado, onde o problema se reduz a solução de equações algébricas;
2. Avaliar o forçante no intervalo de interesse;
3. A cada passo no tempo:
 - Calcular os coeficientes de Fourier do forçante da equação original;
 - Resolver a EDO, usando as equações obtidas no passo (1), discretizando no tempo, por exemplo, por Runge-Kutta, obtendo os coeficientes da aproximação \hat{u}_k ;

4. Impor as condições de contorno, calculando o coeficiente \hat{u}_0 . Este coeficiente deve ser calculado de forma a evitar a degradação da acurácia final desejada;
5. Calcular os coeficientes de Gegenbauer, a partir dos coeficientes de Fourier;
6. Calcular numericamente a aproximação por polinômios de Gegenbauer;
7. Calcular a aproximação por Fourier (para comparação);
8. Avaliar se a seqüência de aproximações obtidas converge à solução do problema;
9. Avaliar se a seqüência de aproximações converge à taxa desejada.

5.3 Aplicação a Equações Diferenciais 2-D

5.3.1 Problema-modelo 1

Considere a equação de Poisson com condições de contorno periódicas, no domínio $\Omega = (-1, 1)^2$.

$$-\nabla^2 u = f(x, y), \quad (5.19)$$

$u(x, y)$ exata é dada por

$$u(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(3\pi y)$$

e o forçante é

$$f = -[u_{xx} + u_{yy}]$$

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Aplicamos a transformada de Fourier em (5.19), e obtemos os coeficientes $\hat{u}_{m,n}$

$$\hat{u}_{m,n} = \frac{\hat{f}_{m,n}}{\pi^2 (m^2 + n^2)} \quad (5.20)$$

Calculamos $\hat{u}_{0,0}$ impondo as condições de contorno, que são periódicas, logo

$$\hat{u}_{0,0} = 0 \quad (5.21)$$

Com as equações (5.20) e (5.21) determinamos os coeficientes de Fourier do forçante e depois calculamos $\hat{u}_{m,n}$.

N	8	16
$\ e\ _{\infty}^F$	2.40E-5	2.79E-14

Tabela 5.13: Erro máximo na expansão de Fourier na aproximação de uma função periódica.

Podemos observar com os dados da tabela 5.13 que, utilizar o método de Fourier para problemas periódicos, conseguimos convergência espectral se o forçante for suave. A aproximação é semelhante às figuras 5.7 e 5.8.

5.3.2 Problema-modelo 2

Considere a equação de Helmholtz com condições de contorno periódicas, no domínio $\Omega = (-1, 1)^2$

$$-\nabla^2 u + \mu^2 u = f(x, y), \quad (5.22)$$

$u(x, y)$ exata é dada por

$$u(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(3\pi y)$$

neste caso, o forçante agora é

$$f = -[u_{xx} + u_{yy}] + \mu^2 u(x, y)$$

onde $\mu = 1$.

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Aplicamos a transformada de Fourier em (5.22), e obtemos os coeficientes $\hat{u}_{m,n}$

$$\hat{u}_{m,n} = \frac{\hat{f}_{m,n}}{\pi^2 (m^2 + n^2) + \mu^2} \quad (5.23)$$

Calculamos $\hat{u}_{0,0}$ impondo as condições de contorno, que são periódicas, logo

$$\hat{u}_{0,0} = \frac{\hat{f}_{0,0}}{\mu^2} \quad (5.24)$$

Com as equações (5.23) e (5.24) determinamos os coeficientes de Fourier $\hat{u}_{m,n}$.

N	8	16
$\ e\ _{\infty}^F$	2.41E-5	2.80E-14

Tabela 5.14: Erro máximo na expansão de Fourier na aproximação de $u(x, y)$ exata.

Como estamos aproximando um problema periódico e o forçante é suave, o método de Fourier apresenta convergência espectral. A aproximação pode ser visualizada nas figuras 5.7 e 5.8.

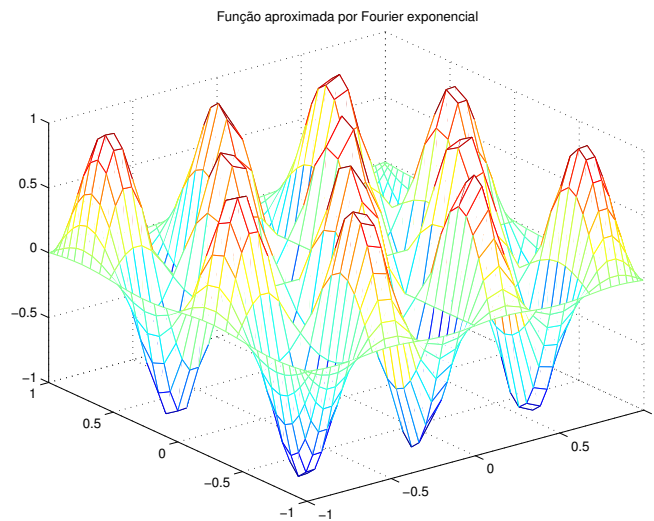


Figura 5.7: Aproximação de Fourier para $u(x, y)$ exata com $N=16$.

5.3.3 Problema-modelo 3

Considere a equação de Poisson no domínio $\Omega = (-1, 1)^2$

$$-\nabla^2 u = f(x, y), \quad (5.25)$$

com as seguintes condições de contorno

$$u(-1, y) = u(1, y)$$

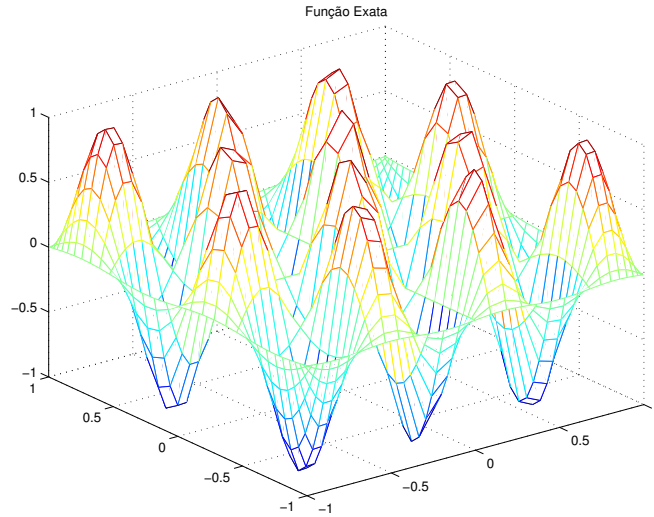


Figura 5.8: $u(x, y)$ exata

$$u(x, -1) = u(x, 1) = 0$$

$u(x, y)$ exata é dada por

$$u(x, y) = (1 - y^2) \sin(\pi \cos((x + 1)\pi))$$

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Integrando (5.25) com relação a x temos

$$u_x(1, y) - u_x(-1, y) + 2\hat{u}_{0,yy} = -2\hat{f}_0(y) \quad (5.26)$$

Aplicamos a transformada de Fourier em x (periódico), obtemos um conjunto de equações 1-D para os coeficientes de Fourier

$$-\frac{d^2}{dy^2}\hat{u}_k(y) + k^2\pi^2\hat{u}_k(y) = \hat{f}_k(y) + \mu_0(-1)^k, \quad 0 < |k| \leq N/2 \quad (5.27)$$

onde

$$\mu_0 = \frac{u_x(1, y) - u_x(-1, y)}{2}$$

$$\hat{u}_k(-1) = \hat{u}_k(1) = 0$$

para $u(x, y)$ periódica em x , $\mu_0 = 0$. Neste caso,

$$-\frac{d^2}{dy^2}\hat{u}_k(y) + k^2\pi^2\hat{u}_k(y) = \hat{f}_k(y), \quad 0 < |k| \leq N/2 \quad (5.28)$$

onde

$$\hat{u}_k(-1) = \hat{u}_k(1) = 0$$

Então, o problema 2-D com uma direção periódica é reduzido a sucessivas soluções de problemas 1-D (Helmholtz) na direção y (não periódica). Logo, utilizamos o algoritmo da seção anterior, desenvolvido utilizando a metodologia proposta no presente trabalho, na solução do problema. Para o caso onde $k = 0$, na equação (5.28), usamos o algoritmo que resolve Poisson 1-D. De (5.26) temos

$$\frac{d^2}{dy^2}\hat{u}_0(y) = -\hat{f}_0(y) \quad (5.29)$$

com as condições de contorno

$$\hat{u}_0(-1) = \hat{u}_0(1) = 0$$

Os resultados podem ser visualizados na tabela 5.15.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _\infty^{FG}$	4.25E-1	6.74E-4	6.20E-5	2.33E-5	4.85E-6

Tabela 5.15: Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ exata periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$).

Podemos observar pela tabela 5.15 que o erro não decai espectralmente. Isto se deve aos erros de arredondamento no cálculo de \hat{u}_0 , como visto na seção de problemas 1-D.

5.3.4 Problema-modelo 4

Considere a equação de Helmholtz no domínio $\Omega = (-1, 1)^2$

$$-\nabla^2 u + \mu^2 u = f(x, y), \quad (5.30)$$

com as seguintes condições de contorno

$$u(-1, y) = u(1, y)$$

$$u(x, -1) = u(x, 1) = 0$$

$u(x, y)$ exata é dada por

$$u(x, y) = (1 - y^2) \sin(\pi \cos((x + 1)\pi))$$

Formulação Aplicando a Metodologia Proposta

Integrando (5.30) com relação a x temos

$$u_x(1, y) - u_x(-1, y) + 2\hat{u}_{0,yy} + \mu^2 \hat{u}_k(y) = -2\hat{f}_0(y) \quad (5.31)$$

Aplicamos a transformada de Fourier em x (periódico), obtemos um conjunto de equações 1-D para os coeficientes de Fourier

$$-\frac{d^2}{dy^2} \hat{u}_k(y) + (k^2 \pi^2 + \mu^2) \hat{u}_k(y) = \hat{f}_k(y) + \mu_0 (-1)^k, \quad -N/2 \leq k \leq N/2 \quad (5.32)$$

onde

$$\mu_0 = \frac{u_x(1, y) - u_x(-1, y)}{2}$$

Como no problema modelo 3 desta seção, para $u(x, y)$ periódica em x , $\mu_0 = 0$, logo

$$-\frac{d^2}{dy^2} \hat{u}_k(y) + (k^2 \pi^2 + \lambda^2) \hat{u}_k(y) = \hat{f}_k(y), \quad -N/2 \leq k \leq N/2 \quad (5.33)$$

onde

$$\hat{u}_k(-1) = \hat{u}_k(1) = 0$$

Da mesma forma, a solução da equação de Helmholtz 2-D com uma direção periódica é reduzido a sucessivas soluções de problemas 1-D (Helmholtz) na direção y (não periódica). Neste passo, utilizamos o algoritmo apresentado na seção de problemas 1-D, desenvolvido utilizando a metodologia proposta no presente trabalho.

A aproximação numérica pelo método de Fourier é dada por:

$$\hat{u}_N^{Fo}(x, y) = \sum_{k=-N/2}^{N/2} \hat{u}_k(y) e^{(ik\pi x)}$$

A aproximação final por Fourier-Gegenbauer é:

$$\hat{u}_N^{FG}(x, y) = \sum_{k=0}^m \hat{u}_k^\lambda(y) C_k^\lambda(x)$$

Os resultados da aproximações são apresentados na tabela 5.16 e nas figuras 5.9 e 5.10.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _\infty^{FG}$	4.14E-1	6.76E-4	6.26E-5	2.35E-5	4.89E-6

Tabela 5.16: Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$).

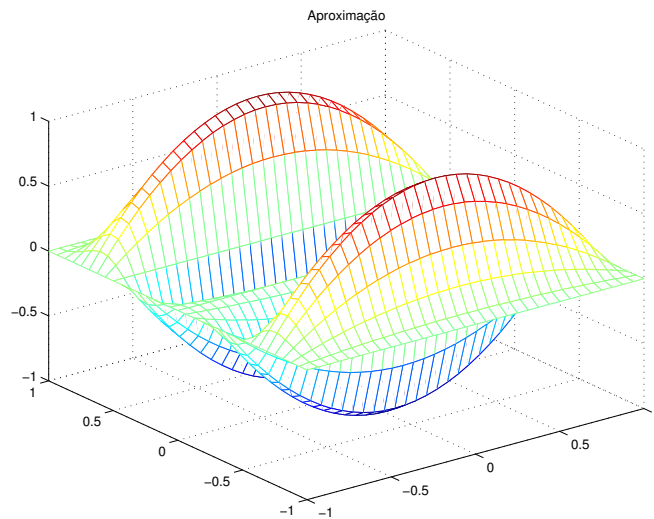


Figura 5.9: Aproximação de Fourier-Gegenbauer para $u(x, y)$ com $N=32$.

Novamente observamos que o decaimento espectral do erro é impedido pelos efeitos dos erros de arredondamento. Verificamos a seguir se o mesmo ocorre no caso da metodologia proposta por Vozovoi e co-autores (1997).

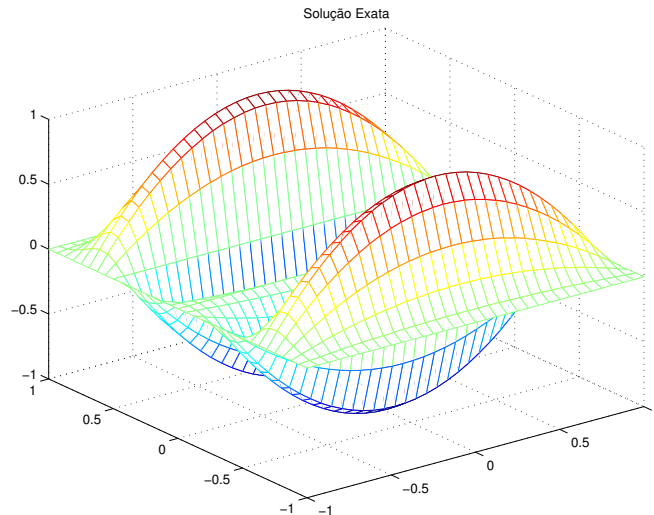


Figura 5.10: $u(x, y)$ exata com $N=32$.

Formulação Proposta por Vozovoi e co-autores (1997)

Aplicamos a transformada de Fourier em x (periódico), obtemos um conjunto de equações 1-D para os coeficientes de Fourier.

Resolvemos da mesma forma como no caso anterior, ou seja, resolvemos problemas 1-D na direção y utilizando o método proposto por Vozovoi e co-autores. Os resultados apresentados na tabela 5.17 foram obtidos com a implementação do método de Vozovoi apresentado na seção de problemas 1-D.

N	8	16	32	64	128
$\ e\ _{\infty}^{FG}$	4.42E-1	6.16E-2	4.28E-2	2.24E-2	8.81E-4

Tabela 5.17: Erro máximo de Fourier-Gegenbauer na aproximação de $u(x, y)$ periódica em x e com condições de contorno de Dirichlet homogêneas em y ($\mu = 1$).

Observamos que o procedimento proposto pelos autores tem efeitos ainda mais severos sobre a acurácia final da aproximação. Os erros de arredondamento são também neste caso os causadores da baixa acurácia obtida.

5.3.5 Metodologia

Nesta seção apresentamos uma metodologia, e suas variações, para resolver equações diferenciais em domínios bidimensionais:

Problemas periódicos

1. Aplicar o método de Fourier clássico à equação diferencial, resolvendo-a no espaço transformado, onde o problema se reduz a solução de equações algébricas;
2. Avaliar o forçante no intervalo de interesse;
3. Calcular os coeficientes de Fourier do forçante;
4. Resolver a EDP, usando as equações obtidas no passo (1), calculando os coeficientes da aproximação $\hat{u}_{m,n}$;
5. Impor as condições de contorno, calculando o coeficiente $\hat{u}_{0,0}$. Este coeficiente deve ser calculado de forma a evitar a degradação da acurácia final desejada;
6. Calcular a aproximação por Fourier;
7. Avaliar se a seqüência de aproximações obtidas converge à solução do problema;
8. Avaliar se a seqüência de aproximações converge à taxa desejada.

Problemas Periódico-Dirichlet

1. Aplicar o método de Fourier clássico à equação diferencial na direção periódica (x), resolvendo-a no espaço transformado, onde o problema se reduz a solução de equações unidimensionais;
2. Para cada y
 - Avaliar o forçante no intervalo de interesse;
 - Calcular os coeficientes de Fourier do forçante (na direção x);

3. Para cada k

- Resolver na direção não periódica, sucessivos problemas 1-D (Helmholtz - equação resultante no passo (1)), obtendo os coeficientes da aproximação $\hat{u}_k(y)$;

4. Para a equação de Poisson: Impor as condições de contorno, calculando o coeficiente $\hat{u}_0(y)$. Este coeficiente é calculado utilizando outro problema 1-D (equação de Poisson).

5. Para cada y

- Avaliar os coeficientes de Gegenbauer;
- Obter a série em polinômios de Gegenbauer;
- Calcular a aproximação aplicando a transformada inversa de Fourier na direção x ;

6. Avaliar se a sequência de aproximações obtidas converge à solução do problema;

7. Avaliar se a sequência de aproximações converge à taxa desejada.

5.3.6 Verificação da Convergência de u aproximado para u exato

Uma vez obtida a solução aproximada, é necessário verificar se a solução numérica está de fato convergindo à solução exata do problema. Esta verificação se faz da seguinte maneira:

1. Calcula-se a expansão de Gegenbauer em pontos de colocação de Chebyshev;
2. Avalia-se os coeficientes das séries em polinômios de Chebyshev correspondentes a estes valores discretos (interpolação);
3. Utilizando sub-rotinas para o cálculo de derivadas de qualquer ordem, avalia-se o resíduo da equação ($Lu = f$) nos pontos de colocação.

Se o resíduo for menor que uma certa tolerância ϵ , consideramos que a solução obtida é satisfatória.

Para os casos apresentados, analisamos a ordem de convergência do método através do gráfico $\log_{10} erro$ em função de N (número de termos da série de Fourier), conforme descrito na seção 1 deste capítulo.

Capítulo 6

Considerações Finais

Resumo: Neste último capítulo delineamos os passos futuros em conexão com o material desenvolvido nesta dissertação.

A aplicação direta do método de Fourier-Gegenbauer à resolução de equações diferenciais elípticas encontra certos obstáculos (numéricos) à obtenção da desejada convergência espectral.

Nas metodologias propostas, empregamos variações adequadas dos métodos de Fourier. Como já sabemos, as séries de Fourier não apresentam boa aproximação para problemas não periódicos. No entanto, aplicando o pós-processamento por Fourier-Gegenbauer eliminamos as oscilações espúrias associadas ao fenômeno de Gibbs e atingimos convergência espectral, se os dados do problema são suficientemente suaves. Empregamos esta metodologia na solução de problemas-modelo representativos das equações de importância em esquemas numéricos para resolução das equações bidimensionais transientes e incompressíveis de Navier-Stokes. Mais especificamente, vários esquemas de passos fracionados no tempo envolvem a resolução de equações de Poisson e Helmholtz (ver Canuto e co-autores (1988)), desenvolvidos neste trabalho.

Para ilustrar como se pode aplicar os procedimentos desenvolvidos às equações de Navier-Stokes, considere o seguinte problema de condução de calor bidimensional transiente com fonte de calor:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + g$$

com condições de contorno homogêneas de Dirichlet no domínio $\Omega = (-1, 1)^2$. Resolvemos eficiente e precisamente este problema através do seguinte esquema de passos fracionados:

$$\frac{u^{(n+1/3)} - u^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \partial_{xx} (u^{(n+1/3)} - u^{(n)}) \quad [yfixo]$$

$$\frac{u^{(n+2/3)} - u^{(n+1/3)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \partial_{yy} (u^{(n+2/3)} - u^{(n+1/3)}) \quad [xfixo]$$

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n+2/3)}}{\Delta t} = g^{(n+1)}$$

Portanto, resolve-se duas equações de Helmholtz unidimensionais a cada passo no tempo, ou alternativamente, podemos evitar o esquema de passos fracionados resolvendo uma equação de Helmholtz bidimensional a cada passo temporal.

Bibliografia

- [1] Babuska, I., Suri, M., The p and h-p versions of the finite element method, basic principles and properties, SIAM Review, 36(4), 578, 1994.
- [2] Becker, E. B., Carey, G. F., Oden, J. T., Finite elements: an introduction, Vol. 1, Prentice-Hall, Inc., 1981.
- [3] Briggs, W. L., Henson, V. E., The DFT: an owner's manual for the discrete Fourier transform, SIAM, 1995.
- [4] Boyd, J. P., Two Comments on Filtering (Artificial Viscosity) for Chebyshev and Legendre spectral and spectral element methods: preserving boundary conditions and interpretation of the filter as a diffusion, J. Comput. Phys., 143, 283-288, 1998.
- [5] Boyd, J. P., The optimization of convergence for Chebyshev polynomial methods in an unbounded domain, J. Comput. Phys., 45, 43-79, 1982.
- [6] Boyd, J. P., Chebyshev and Fourier spectral methods, Dover, 2000.
- [7] Braess, D., Finite elements. Theory, fast solvers, and applications in solid mechanics, Cambridge University Press, 1997.
- [8] Brenner, S. C., Scott, L. R., The mathematical theory of finite element methods, Springer-Verlag, 1994.
- [9] Ciarlet, P. G., The finite element method for elliptic problems, North-Holland, 1978.
- [10] Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A., Zang, T. A., Spectral methods in fluid dynamics, Springer-Verlag, 1988.

- [11] Davis, P. J., Interpolation and approximation, Dover Publications Inc., 1975.
- [12] Eckhoff, K. S., Accurate reconstructions of functions of finite regularity from truncated Fourier series expansions, *Math. Comp.*, 64(21), 671-690, 1995.
- [13] Eckhoff, K. S., Accurate and efficient reconstruction of discontinuous functions from truncated series expansions, *Math. Comp.*, 61, 745-763, 1993.
- [14] Gelb, A., Gottlieb, D., The resolution of the Gibbs phenomenon for “spliced” functions in one and two dimensions, *Computers Math. Applic.*, 33(11), 35-58, 1997.
- [15] Girault, V., Raviart, P. A. Finite element methods for Navier-Stokes equations. Theory and Algorithms. Springer-Verlag, 1986.
- [16] Gottlieb, D., Orszag, S. A., Numerical analysis of spectral methods: theory and applications, SIAM-CBMS, 1977.
- [17] Gottlieb, D., Shu, C.-H., Solomonoff, A., Vandevean, H., On the Gibbs phenomenon I: recovering exponential accuracy from the Fourier partial sum of a non-periodic analytic function, *J. Comput. Appl. Math.*, 43, 81-98, 1992.
- [18] Gottlieb, D., Shu, C.-H., On the Gibbs phenomenon II, Resolution properties of the Fourier method for discontinuous waves, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engin.*, 116, 27-37, 1994.
- [19] Gottlieb, D., Shu, C.-H., On the Gibbs phenomenon III: recovering exponential accuracy in a sub-interval from the spectral partial sum of a piecewise analytic function, *SIAM J. Numer. Anal.*, 33, 280-290, 1996.
- [20] Gottlieb, D., Shu, C.-H., On the Gibbs phenomenon IV: recovering exponential accuracy in a sub-interval from the Gegenbauer partial sum of a piecewise analytic function, *Math. Comp.*, 64, 1081-1095, 1995a.
- [21] Gottlieb, D., Shu, C.-H., On the Gibbs phenomenon V: recovering exponential accuracy from collocation point values of a piecewise analytic function, *Numer. Math.*, 71, 511-526, 1995b.

- [22] Gottlieb, D., Shu, C.-H., On the Gibbs phenomenon and its resolution, SIAM Review, 39, 644-668, 1997.
- [23] Gottlieb, D., Hesthaven, J. S., Spectral methods for hyperbolic problems, J. Comp. Appl. Math., 128, 83-131, 2001.
- [24] Korczak, K. Z., Patera, A. T., An isoparametric spectral element method for solution of the Navier-Stokes equations in complex geometry, Department of Mechanical Engineering, 1985.
- [25] Kress, R., Linear integral equations, Appl. Math. Sci., vol. 82, Springer-Verlag, 1989.
- [26] Kreyszing, E., Introductory functional analysis with applications, John Wiley Sons. Inc., 1978.
- [27] Lyness, J. N., The calculation of trigonometric Fourier coefficients, J. Comput. Phys., 54, 57-73, 1984.
- [28] Maliska, C. R., Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional, Livros Técnicos e Científicos Editora, 1995.
- [29] Maliska, C. R., Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional, Livros Técnicos e Científicos Editora, 2003.
- [30] Oden J. T., Reddy, J. N., An introduction to the mathematical theory of finite elements, John Wiley Sons. Inc, 1976.
- [31] Oliveira, J. C., Métodos espectrais e seus derivados. In: Deschamps, C. J.; Barbosa, Jr, J. R. (orgs). III Escola de Primavera em Transição e Turbulência. Florianópolis, Departamento de Engenharia Mecânica - UFSC, 2002, V.1, p. 365-404.
- [32] Oliveira, J. C., Silva, A. V., Numerical investigation of the Fourier-Gegenbauer method applied to boundary value problems, 20th Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE)/1st Brazilian Congress on Computational Mechanics, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 1999.

- [33] Orszag, S. A., Spectral methods for problems in complex geometries, *J. Comput. Phys.*, 37, 70-92, 1980.
- [34] Orszag, S. A., Numerical simulation of incompressible flows within simple boundaries I. Galerkin (spectral) representations, *Stud. Appl. Math.*, 50, 293-327, 1971.
- [35] Orszag, S. A., Spectral methods for problems in complex geometries, *J. Comput. Phys.*, 37, 70-92, 1980.
- [36] Orszag, S. A., Comparison of pseudospectral and spectral approximation, *Appl. Math.*, 3, 253-259, 1972.
- [37] Patera, A. T., A spectral element method for fluid dynamics: laminar flow in a channel expansion, *J. Comput. Phys.*, 54, 468-488, 1984.
- [38] Patankar, S. V., Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [39] Pina, H., Métodos numéricos, McGraw-Hill, 1995.
- [40] Raw, M. J., A new control volume based finite element procedure for the numerical solution of the fluid flow and scalar transport equations, Tese de Doutorado, Universidade de Waterloo, Canada, 1995.
- [41] Shi, Z., Hassard, B., Precise Solution of Laplace's Equation, *Math. Comp.* 64(210), 515-536, 1995.
- [42] Strikwerda, J. C., Finite difference schemes and partial differential equations, Wadsworth Brooks/Cole Advanced Books Software, Pacific Grove, California, 1989.
- [43] Temperton, C., Self-sorting mixed-radix fast Fourier transforms, *J. Comput. Phys.* 52, 1-23, 1983.
- [44] Thomas, G. W., Numerical partial differential equations, finite difference methods, Springer-Verlag, 1995.

- [45] Van Loan, C., Computational frameworks for the fast Fourier transform, SIAM, 1992.
- [46] Vozovoi, L., Israeli, M., Averbuch, A., Spectral multidomain technique with local fourier basis, J. Comput., 8, 135-149 1993.
- [47] Vozovoi, L., Israeli, M., Averbuch, A., A fast Poisson solver of arbitrary order accuracy in rectangular regions, SIAM J. Numer. Anal., 33, 1844-1863, 1996a.
- [48] Vozovoi, L., Israeli, M., Averbuch, A., Analysis and application of Fourier-Gegenbauer method to stiff differential equations, SIAM J. Numer. Anal., 33, 1844-1863, 1996b.
- [49] Vozovoi, L., Weill, A., Israeli, M., Spectrally accurate solution of non-periodic differential equations by the Fourier-Gegenbauer method, SIAM J. Numer. Anal., 34, 1451-1471, 1997.
- [50] Zygmund, A., Trigonometric Series, Cambridge university, 1968.